

**ESTUDIO DE LAS TRANSICIONES DE FASE EN UN MODELO
TIPO ISING CON PARÁMETRO DE INTERACCIÓN
DEPENDIENTE DE LA ORIENTACIÓN DEL ESPÍN**

MATÍAS PABLO BORGHI ORUÉ

**DIRECTOR:
PROF. DR. EZEQUIEL V. ALBANO**



**Departamento de Física
Facultad de Ciencias Exactas
Universidad Nacional de La Plata**

Junio 2017

Matías Pablo Borghi Orué: *Estudio de las transiciones de fase en un modelo tipo Ising con parámetro de interacción dependiente de la orientación del espín*, Junio 2017

DIRECTOR:

Prof. Dr. Ezequiel V. Albano

LUGAR:

Departamento de Física
Facultad de Ciencias Exactas
Universidad Nacional de La Plata
La Plata

RESUMEN

El modelo estudiado es un sistema del tipo Ising en 2 dimensiones con parámetro de interacción $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ dependiente de la orientación de los espines. Para el caso en que $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ se obtiene el modelo de Ising usual [1].

Se determinaron las temperaturas críticas del sistema y el tipo de transición de fase para diversos valores de $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ a través del comportamiento de la susceptibilidad y el cumulante de Binder. En el caso de tratar con temperaturas críticas finitas y no nulas se determinó que las transiciones eran de segundo orden o continuas, mientras que, por ejemplo, la temperatura crítica correspondiente para el modelo de Ising usual correspondía con el conocido de $k_B T_c/J = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \sim 2,269$. El uso del método de escaleo de tamaño finito permitió determinar las clases de universalidad del sistema.

Conociendo las temperaturas críticas en un conjunto de puntos se determinó el diagrama de fases del sistema T_c en función de $\alpha_{\uparrow\downarrow}$.

El caso correspondiente a $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ requirió un análisis por separado ya que presentaba una complejidad adicional respecto a los casos restantes, debido a que se sospechaba que poseía un punto crítico a temperatura nula, caso similar a lo que sucede con el modelo de Ising en una dimensión. Es por ello que primero se estudió la dinámica a tiempos cortos, haciendo un paralelismo al modelo de Ising en una dimensión sin obtener resultados satisfactorios.

Luego se estudió el mismo sistema agregando un campo magnético externo para estudiar nuevamente el comportamiento crítico cuando el campo es suficientemente pequeño. Se llegó a un resultado satisfactorio al comparar estos resultados con un desarrollo analítico teniendo en cuenta que en el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ el Hamiltoniano es, a diferencia de una constante, similar al de un material paramagnético, pudiendo afirmar que el sistema no ordena a $T_c = 0$.

ÍNDICE GENERAL

1	INTRODUCCIÓN	1
2	CONCEPTOS FUNDAMENTALES DE MECÁNICA ESTADÍSTICA	3
2.1	Equilibrio termodinámico	5
2.2	Fluctuaciones y límite termodinámico	8
2.3	Ejemplo: el modelo de Ising	9
3	TRANSICIONES DE FASE	13
3.1	Tipos de transiciones de fase	14
3.2	Transiciones de fase en el modelo de Ising Ferromagnético	16
3.3	Longitud de correlación	19
3.4	Exponentes críticos	19
3.5	Universalidad	20
3.6	Exponentes dinámicos	22
4	SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN EQUILIBRIO TÉRMICO	23
4.1	El estimador	24
4.2	Muestreo de importancia	25
4.2.1	Proceso de Markov	26
4.2.2	Ergodicidad	27
4.2.3	Balance detallado	27
4.2.4	Tasa de aceptación	28
5	EL ALGORITMO DE METRÓPOLIS	31
5.1	Modelo a estudiar	31
5.2	Introducción al algoritmo	31
5.3	Implementación del algoritmo de Metrópolis	33
5.4	Equilibrio	37
5.5	Medición en el equilibrio	39
5.6	Cálculo de errores	40
5.6.1	Estimación de errores estadísticos	41
5.6.2	Estimación de errores sistemáticos	42
5.7	Fluctuaciones críticas y enlentecimiento crítico	42
5.8	Algoritmo de Wolff	44
6	MÉTODO DE ESCALEO DE TAMAÑO FINITO	47
6.1	Escaleo de tamaño finito extendido	48
7	RESULTADOS	51
7.1	Determinación de la temperatura crítica del sistema	52
7.2	Determinación de los exponentes críticos y la clase de Universalidad	55
7.3	Diagrama de Fases	58
7.4	Caso: $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$	59
7.4.1	Implementación con campo magnético	60

7.4.2	Dinámica crítica a tiempos cortos	64
7.4.3	Desarrollo analítico del modelo	70
7.4.4	Resultados con campo magnético externo pequeño $H \rightarrow 0$	77
8	CONCLUSIÓN	81
	BIBLIOGRAFÍA	83

ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 1 Relación entre las variables termodinámicas a partir de la función de partición para sistema magnético y un fluido. Figura obtenida de [9]. [7](#)
- Figura 2 Posibles arreglos regulares de espines en representación de posibles materiales magnéticos. [9](#)
- Figura 3 Interacción entre espines a primeros vecinos en una, dos y tres dimensiones. [10](#)
- Figura 4 **(Izquierda)** Dependencia con la temperatura de la energía libre y la energía interna para una sistema en una transición de primer orden. Si hay una discontinuidad finita en una o mas de las derivadas primeras del potencial termodinámico apropiado entonces la transición es de primer orden. **(Derecha)** Dependencia con la temperatura de la energía libre y la energía interna para una sistema en una transición de segundo orden. Si las derivadas primeras son continuas pero las segundas son discontinuas o infinitas entonces la transición será descrita como de segundo orden o continua. Figura obtenida de [15]. [13](#)
- Figura 5 Ejemplos de diagramas de fases. **(Izquierda)** Diagramas de fases simplificado de presión-temperatura del agua. **(Centro)** Diagramas de fases campo magnético-temperatura para un ferromagneto tipo Ising. **(Derecha)** Diagramas de fases campo magnético-temperatura para un antiferromagneto tipo Ising. Figura obtenida de [15]. [15](#)
- Figura 6 Densidad de un fluido a lo largo de la curva de coexistencia de vaporización. $(\rho_{\text{líquido}}(T) - \rho_{\text{gas}}(T))$ es el parámetro de orden de la transición líquido-gas. Figura obtenida de [9]. [16](#)
- Figura 7 Calor específico del Argón a volumen constante medido en la isocora crítica, $\rho = \rho_c$. La divergencia de la capacidad calorífica es una señal de transición de segundo orden [22]. Figura obtenida de [9] [16](#)

Figura 8	(a)Diagrama de fases de un ferromagneto. Existe una linea de transiciones de primer orden a lo largo de $H=0$ que terminan en $T = T_c$. (b) Dependencia con el campo de la energía libre. (c) Dependencia con el campo de la magnetización. (d) Dependencia con el campo de la susceptibilidad. (e) Dependencia de la magnetización con la temperatura. (f) Dependencia de la susceptibilidad con la temperatura. Figura obtenida de [9]. 18
Figura 9	Curva de coexistencia entre ocho fluidos distintos mostrada en función de sus variables reducidas. El ajuste arroja un exponente crítico $\beta = 1/3$. Figura obtenida de [9]. 21
Figura 10	Vista esquemática de la relación entre teoría, experimento y simulación computacional. Imagen obtenida de [15]. 24
Figura 11	Tasa de aceptación: linea sólida muestra la ecuación 42. Esta muestrea la distribución de Boltzmann correctamente pero es muy ineficiente debido a que no acepta la mayoría de las nuevas configuraciones. La tasa de aceptación de Metrópolis (linea punteada), ecuación 43, es mucho más eficiente. Imagen obtenida de [7]. 33
Figura 12	Efecto de las condiciones periódicas de contorno sobre un espín s_i en el borde de una red de dos dimensiones. Este espín interactúa de la forma $-\alpha_{ij} s_i \cdot s_j$ con los primeros vecinos s_1 , s_2 y s_3 , dado por el Hamiltoniano de la ecuación 41. Al no haber un espín del lado izquierdo de s_i , las condiciones de contorno periódicas simulan que interactúa de la misma manera que los espines anteriores pero correspondiéndole un espín del borde opuesto, en este caso, s_4 de la forma $-\alpha_{ij} s_i \cdot s_4$. Para espines ubicados en otro borde de la red el comportamiento será análogo. 34
Figura 13	Condiciones de contorno usuales en una red cuadrada: (Izquierda) Condiciones de contorno periódicas. (Centro) Condiciones de contorno periódicas helicoidales. (Derecha) Condiciones de contorno libres. Figura obtenida de [15]. 34
Figura 14	Diagrama de bloques que representa la implementación del algoritmo de Metrópolis. 36

- Figura 15 Gráficos correspondientes a una red de 100x100 para el modelo de Ising usual $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ sobre la medición de cantidades termodinámicas de interés con la finalidad de determinar el tiempo de equilibrio del sistema, τ_{eq} . 38
- Figura 16 Instantáneas de una red 100x100 correspondiente al modelo de Ising usual con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ iniciando a temperatura cero llegando al equilibrio a una temperatura $T = 2,4T_c$ usando el algoritmo de Metrópolis. Los dos colores representan a espines ± 1 . Los tiempos correspondientes a cada instantánea se indican en la figura. En la última el sistema llegó al equilibrio. 39
- Figura 17 Inversión de los espines en el algoritmo de Wolff. Una lista o cluster de espines está compuesta por un conjunto de espines paralelos. Su límite está indicado por las líneas punteadas, mientras que los espines encerrados no pertenecen a la misma. 45
- Figura 18 Susceptibilidad en función de la temperatura para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ y tamaños de red $L=32,64,128,256,512$. 52
- Figura 19 Cumulante U_4 en función de la temperatura para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ y tamaños de red $L=32,64,128,256,512$. Puede notarse que a medida que aumenta el tamaño de la red para $T < T_c$ el cumulante tiende al valor $2/3$. Mientras que a medida que para $T > T_c$ el cumulante tiende a cero. A su vez, las curvas prácticamente pasan por el mismo punto en el punto crítico. 54
- Figura 20 Ajuste polinómico de grado 3 realizado a sobre los datos de la figura 19 para redes de tamaño $L=128$ y $L=64$. El corte entre las curvas determina un valor de temperatura crítica para un dado tamaño finito de red. 55
- Figura 21 Colapso de datos de la magnetización por espín, el cumulante de Binder y la susceptibilidad para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$. 57
- Figura 22 Diagrama de fases del modelo con Hamiltoniano $\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j$ 65. Las transiciones de fase distinguen tres regiones: una región ferromagnética, una paramagnética y una antiferromagnética. 58

- Figura 23 Instantáneas del estado final en equilibrio del sistema para $T=1.0$ y $L=100$ para valores de $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -10, -1,85, -1$ y 1 . Los colores rojo y azul denotan espines $+1$ o -1 . Las primeras dos figuras corresponden a estados con transición antiferromagnética. Para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -10$ el sistema se encuentra en la fase antiferromagnética, mientras que para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1,85$ en la fase paramagnética. La tercer figura corresponde a con el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ de un sistema paramagnético. Por último, la figura de la derecha muestra una instantánea de un estado de equilibrio para el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$, el modelo de Ising usual, en la fase ferromagnética. Notar que, como es de esperarse, en esta fase la mayoría de los espines se encuentran alineados en la misma dirección. [59](#)
- Figura 24 Magnetización en función del campo magnético externo para distintos valores de temperatura y un tamaño de red fija de $L=256$. [61](#)
- Figura 25 Ajuste a las curvas de Magnetización y magnetización cuadrada en función del campo magnético externo aplicado que permite obtener los valores de las cantidades en el límite $H \rightarrow 0$. Los ajustes polinómicos fueron realizados con la función `numpy.polyfit` de *Python* [47, 50]. [62](#)
- Figura 26 Magnetización y magnetización cuadrada en el límite $H \rightarrow 0$ en función de la temperatura reducida $\tau = 1 - \tanh \beta$. [63](#)
- Figura 27 Susceptibilidad y Susceptibilidad colapsada en el límite $H \rightarrow 0$ en función de la temperatura reducida. Claramente obtener un valor negativo de la temperatura indica que hay un error en el método utilizado, el cual es debido al ajuste realizado con polinomios de primer y segundo orden. [64](#)
- Figura 28 Magnetización en función del tiempo para una configuración inicial de magnetización $m_0 = 0,04$ y un tamaño de red $L=256$. [66](#)
- Figura 29 Corroboration de los resultados correspondientes al modelo de Ising 2D, $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ para el método de dinámica crítica a tiempos cortos. Los valores del ajuste realizado se muestran en la tabla 5. Los resultados están en buen acuerdo con los mostrados de la bibliografía dentro de la incertidumbre. [67](#)

Figura 30	Magnetización en función del tiempo para el modelo con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$. Se puede notar que el comportamiento crítico del sistema es independiente tanto del tamaño de red como de la configuración inicial de los espines M_0 . 68
Figura 31	Magnetización en función del tiempo para el modelo con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ y una campo externo aplicado. En las figuras se van variando distintos parámetros del sistema estudiando el comportamiento de la magnetización en cada caso. 70
Figura 32	Gráfico de la entropía en función de β para distintos valores de campos magnéticos externos utilizando la ecuación 88 . 75
Figura 33	Gráfico de la magnetización por espín en función de la temperatura para distintos valores de campos magnéticos externos utilizando la ecuación 86 . 75
Figura 34	Magnetización en función de la temperatura para distintos valores del campo magnético externo H . La forma funcional de dicha cantidad se muestra en la ecuación 92 . Esta coincide con la correspondiente a $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ en 2D para el caso $J=0$, ecuación 86 . 76
Figura 35	Cantidades termodinámicas más importantes simuladas para el modelo con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ y una campo externo aplicado pequeño $H \rightarrow 0$. 78
Figura 36	Funciones trigonométricas. 79
Figura 37	Magnetización para un campo externo $H \sim 0,1015$ con una red de tamaño $L=512$ graficada junto a la función analítica $m \sim \tanh(H\beta)$, ecuación 86 . El acuerdo entre los resultados es claro. 80

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1	Ejemplos de diversas transiciones de fases encontradas en la naturaleza. Tabla obtenida de [9]. 14
Tabla 2	Definiciones del comportamiento crítico de las principales cantidades termodinámicas de un sistema magnético con temperatura crítica finita $T_c > 0$. 20

Tabla 3	Exponentes estáticos ($2\beta/\nu$, β y ν) y dinámicos (z y θ) obtenidos a partir del método de la dinámica crítica a tiempos cortos 7.4.2 para el modelo de Ising en 2D y 3D, junto con los resultados exactos del primer modelo. (*) Indica estimación numérica. Tabla obtenida de [23] . 20
Tabla 4	Comparación de los valores de los exponentes dinámicos z para los algoritmos de Metrópolis, Wolff y Swendsen-Wang en varias dimensiones. Los valores fueron obtenidos de [27, 39, 40] . Tabla obtenida de [7] . 44
Tabla 5	Comparación entre los resultados obtenidos por [24] y los obtenidos en el presente trabajo para los exponentes críticos θ y $\beta/\nu z$. Ambos se encuentran en buen acuerdo dentro de la incertidumbre. 66
Tabla 6	Parámetros de las simulaciones hechas en distintas corridas para dinámica crítica a tiempos cortos para $\alpha = -1$ y un campo magnético externo aplicado H . 69

INTRODUCCIÓN

De todos los modelos en Mecánica Estadística desarrollados, el modelo de Ising bidimensional es, no sólamente el más investigado, sino el más rico dada la simplicidad que presenta[2].

En 1925 E. Ising introdujo el sistema e investigó algunas de sus propiedades en una dimensión [1]. No fue hasta 1941 que Kramers y Wannier calcularon la temperatura crítica [3, 4]. Aunque el descubrimiento más importante sucedió gracias a Onsager en 1944 al calcular las propiedades termodinámicas del modelo de Ising bidimensional en ausencia de un campo magnético externo [5].

La característica más sobresaliente de los sistemas en Mecánica Estadística es la existencia de transiciones de fase. Las transiciones más conocidas son la condensación de vapor en agua líquida o la congelación de agua en hielo. Otra menos conocida es la correspondiente a la fase ferromagnética que toma lugar a la temperatura crítica, aproximada a 1043 K para el hierro. El modelo más conocido que exhibe una transición de fase es el modelo de Ising. En tres dimensiones no existe una solución analítica exacta, mientras que en una dimensión el modelo de Ising no sufre una transición de fase. El modelo bidimensional posee no solo una transición de fase ferromagnética sino que sus propiedades físicas pueden ser calculadas de manera exacta.

A pesar de esto las transiciones de fase no son comprendidas en su totalidad. Un objetivo del modelo de Ising es comprender como interacciones a corto alcance dan lugar a fenómenos correlacionados de largo alcance. El modelo de Ising ha sido aplicado a problemas en Química, Biología Molecular u otras áreas donde se estudia un comportamiento colectivo de sistemas grandes.

Básicamente, el modelo de Ising consiste primero en una red, que es un conjunto finito de puntos espaciados de manera regular. Estas pueden ser de una, dos o tres dimensiones. Siendo en una dimensión una cadena de puntos, en dos dimensiones una red de cuadrados y en tres dimensiones una unidad cúbica repetida. En cada uno de estos sitios se le asigna una variable independiente s_i que puede tomar los valores ± 1 , los estados posibles del sitio de red. Asignarle un dado valor a cada sitio de red proporciona al sistema de una dada configuración.

Por otra parte, el Hamiltoniano del sistema (sin campo magnético externo) que gobernará la dinámica del sistema viene dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i \cdot s_j,$$

donde J es la constante de interacción entre espines, siendo mayor a cero para materiales ferromagnéticos y menor a cero para antiferromagnéticos. Por otra parte $\langle ij \rangle$ implica una sumatoria a primeros vecinos.

El modelo propuesto en el presente trabajo extiende la definición de esta constante de interacción para ser una función dependiente de la orientación de los espines. Es decir en lugar de J se introduce una variable $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ de tal manera que el Hamiltoniano será de la forma

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i \cdot s_j,$$

donde

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} \alpha_{\uparrow\downarrow}, & \text{si } s_i \neq s_j \\ 1, & \text{caso contrario.} \end{cases}$$

Siendo $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ uno de los parámetros a modificar del sistema. El modelo se estudió utilizando simulaciones computacionales mediante el método de Monte Carlo, utilizando principalmente el algoritmo de Metrópolis. A su vez se prefirió utilizar el algoritmo de Wolff para estudiar el comportamiento del sistema cerca del punto crítico en transiciones ferromagnéticas.

La finalidad del presente trabajo es obtener las temperaturas críticas para distintos valores de $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ y determinar el tipo de transición que ocurre, con el objetivo de obtener el diagrama de fases del mismo.

La organización del trabajo se propone como sigue: en el capítulo 2 se hará una introducción a la Mecánica Estadística definiendo la notación a utilizar y los conceptos de equilibrio y límite termodinámico, junto con ciertas cantidades termodinámicas de interés, aplicándolo por último, específicamente al modelo de Ising usual que es un caso especial del que se estudiará en el presente trabajo.

Luego, en el capítulo 3, se describirá un tema central del trabajo, que son las transiciones de fase y los conceptos de exponentes críticos y universalidad.

Continuando, se introducirá en el capítulo 4 conceptos básicos referidos a la simulación computacional de sistemas termodinámicos como muestreo de importancia, ergodicidad y balance detallado.

En el capítulo 5 se describirá el algoritmo utilizado para obtener los datos, el algoritmo de Metrópolis, dando algunos detalles que se consideraron importantes para su implementación.

Luego se introducirá una herramienta importante como es el método de escaleo de tamaño finito en el capítulo 6 junto con una extensión en el caso de temperaturas críticas nulas.

Por último en el capítulo 7 se mostrarán los resultados obtenidos y, finalmente, en el capítulo 8 se presentarán las conclusiones del trabajo.

2

CONCEPTOS FUNDAMENTALES DE MECÁNICA ESTADÍSTICA

El mundo que uno percibe a través de los sentidos se compone de objetos macroscópicos, es decir, grandes comparados con la escala atómica, y, por lo tanto, compuestos de muchos átomos o moléculas. En este sentido se incluyen, por ejemplo, líquidos, sólidos, gases y organismos biológicos en general. El objetivo de la **Mecánica Estadística** es comprender el comportamiento de estos sistemas deduciendo sus características a partir del conocimiento de las propiedades microscópicas. [6]

Los sistemas macroscópicos están compuestos por un número pequeño de constituyentes distintos haciendo que estos sean descritos matemáticamente de una manera simple. Pero el número de ecuaciones hace que sea prácticamente imposible resolverlas. [7]



Como ejemplo, si se considera un gas en un recipiente, como puede ser 1 litro de oxígeno en condiciones normales de presión y temperatura (CNPT), este constará de aproximadamente 3×10^{22} moléculas de oxígeno moviéndose alrededor y colisionando entre sí y con las paredes del recipiente que lo contiene.

Si por ejemplo se considera la atmósfera de la Tierra, esta contiene 4×10^{21} L de aire, o alrededor de 1×10^{44} moléculas!.

No sería muy sabio resolver las ecuaciones de movimiento de estos sistemas por el número grande de las mismas, pero las propiedades macroscópicas del gas parecen comportarse de manera predecible y no brusca. De esta manera, la **Mecánica Estadística** pretende calcular estas propiedades de sistemas grandes tratándolos de una manera probabilística. No se pretende resolver el sistema de manera exacta, sino con las probabilidades de que un sistema se encuentre en un cierto estado.

En este caso consideraremos a un sistema gobernado por un Hamiltoniano \mathcal{H} del cual se obtiene la energía del sistema en un estado en particular.

Si se considera al sistema en un estado μ y se define la cantidad $R(\mu \rightarrow \nu)dt$ como la probabilidad de que el sistema se encuentre en un estado ν en un tiempo dt posterior. $R(\mu \rightarrow \nu)$ es el ritmo de transición de μ a ν y se asumirá que es independiente del tiempo. A su vez, se define el conjunto de pesos $w_\mu(t)$ como la probabilidad de

que el sistema se encuentre en un estado μ en un tiempo t . Se puede escribir una **ecuación maestra** para $w_\mu(t)$ ¹:

$$\frac{dw_\mu(t)}{dt} = \sum_v [w_v(t)R(v \rightarrow \mu) - w_\mu(t)R(\mu \rightarrow v)]. \quad (1)$$

El primer término del lado derecho de la ecuación representa el cambio al cual el sistema realiza transiciones al estado μ . Análogamente el segundo término representa el cambio al cual el sistema realiza transiciones desde el estado v . Las probabilidades $w_\mu(t)$ deben obedecer

$$\sum_\mu w_\mu(t) = 1 \quad (2)$$

dado que el sistema siempre debe estar en algun estado. La solución a la ecuación 1, sujeta a la ligadura 2 dice como varían los pesos $w_\mu(t)$ con el tiempo.

Entonces, ¿cómo se relacionan estos pesos con las propiedades macroscópicas del sistema? Se puede definir el **valor de expectación** de Q a tiempo t

$$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu w_\mu(t) \quad (3)$$

donde Q_μ es el valor que toma la cantidad Q en la cual uno está interesado en un estado μ . La relación de $\langle Q \rangle$ con el valor observado de Q se puede interpretar de dos maneras: la primera, más rigurosa, es imaginar un número grande de copias del mismo sistema cada uno interactuando con su propio reservorio térmico. Entonces $\langle Q \rangle$ es un buen estimador del número que se obtendría al medir el valor instantáneo de la cantidad Q en cada uno de esos sistemas y promediándolos. El inconveniente con esto es que no es lo que suele suceder en un experimento real. La segunda manera es contemplar la expectación como un promedio temporal de la cantidad Q . Esta manera es menos rigurosa por el hecho de que no se sabe cuánto tiempo es una representación selectiva de los estados. Nada garantiza que en una dada franja temporal el sistema pase por uno, por mil o por N estados.

A pesar de estos problemas, la interpretación del promedio temporal es la más utilizada y experimentalmente relevante que es la que se utilizará a lo largo del trabajo.

¹ La ecuación maestra es un conjunto de ecuaciones, una por cada estado μ posible del sistema.

EQUILIBRIO TERMODINÁMICO

Se puede notar que, si en la ecuación 1, los términos de la derecha se cancelan para todo μ , entonces $d w_\mu(t)/dt$ será nulo y $w_\mu(t)$ tomará valores constantes. Esto se conoce como **estado de equilibrio**.

Los valores particulares de $R(\mu \rightarrow \nu)$ serán aquellos que imiten la interacción entre el sistema y el reservorio térmico. Por otra parte, de los pesos $w_\mu(t)$ se conoce el valor en el equilibrio

$$p_\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} w_\mu(t) \quad (4)$$

llamados **probabilidades de ocupación en equilibrio**. Gibbs [8] mostró que para un sistema en equilibrio térmico con un reservorio de temperatura a temperatura T , estas probabilidades son

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu/kT} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}. \quad (5)$$

Esta es la **distribución de Boltzmann**. E_μ es la energía del estado μ , k es la constante de Boltzmann, cuyo valor es $1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ y β se definió como $\beta = 1/kT$. Z es una constante de normalización, conocida como **función de partición** cuyo valor viene dado por

$$Z = \sum_\mu e^{-E_\mu/kT} = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu}. \quad (6)$$

De las ecuaciones (3)–(5) el valor de expectación de Q para un sistema en equilibrio viene dado por

$$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu p_\mu = \frac{1}{Z} \sum_\mu Q_\mu e^{-\beta E_\mu}. \quad (7)$$

Por ejemplo, el valor de expectación de la energía $\langle E \rangle$, la **energía interna** U , es

$$U = \frac{1}{Z} \sum_\mu E_\mu e^{-\beta E_\mu}. \quad (8)$$

Usando la ecuación 6, la ecuación 8 se puede reescribir como

$$U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}. \quad (9)$$

El **calor específico** C_v viene dado por la derivada de la energía interna respecto a la temperatura

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} = -k\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = k\beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}. \quad (10)$$

El calor específico C_v se relaciona con la entropía de acuerdo con

$$C_v = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta}. \quad (11)$$

Por lo que la **entropía** viene definida según

$$S = -k\beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} + k \log Z. \quad (12)$$

Por último la **energía libre de Helmholtz** del sistema es proporcional al logaritmo de la función de partición

$$\mathcal{F} = U - TS = -kT \log Z. \quad (13)$$

Se ha mostrado que la función de partición Z , ecuación 6, lejos de ser una constante sin importancia, permite calcular las principales características macróscopicas de un sistema.

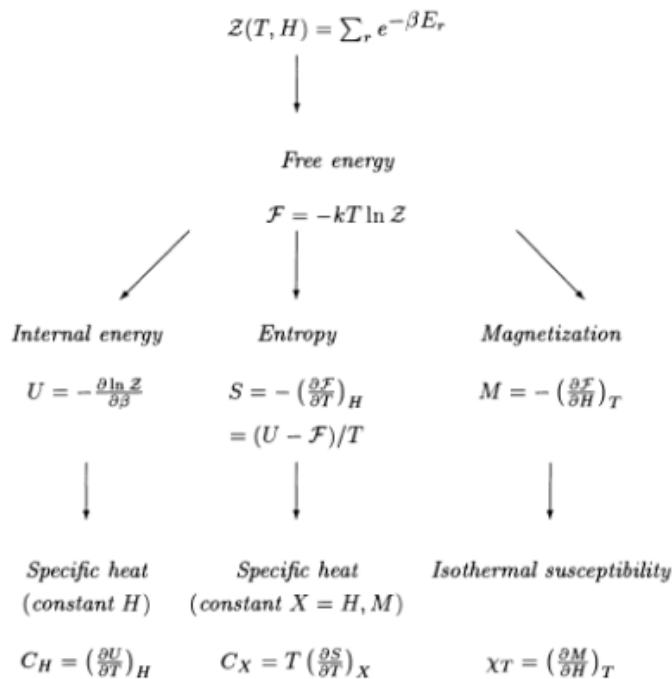
Por otra parte se pueden calcular las variables conjugadas de ciertos parámetros a partir de la energía libre:

$$p = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial V}, \quad (14)$$

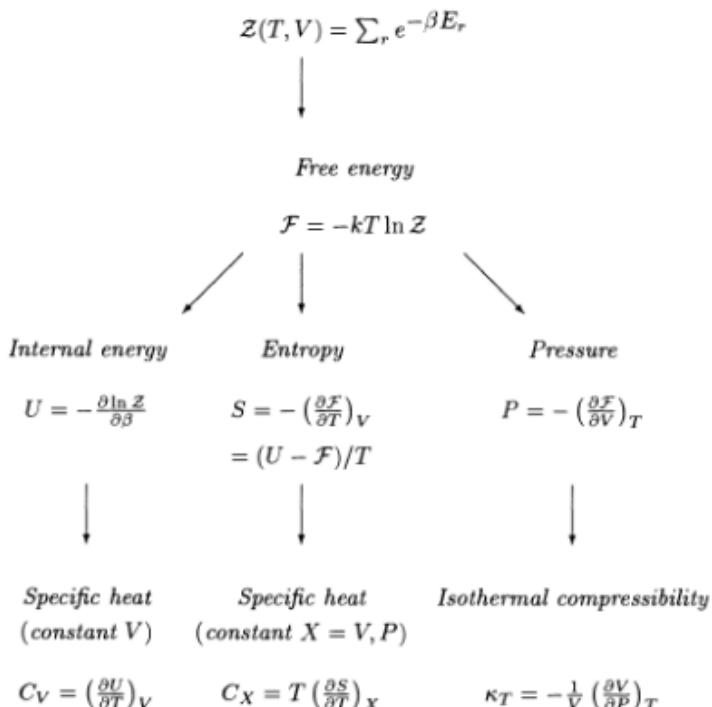
$$M = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H}. \quad (15)$$

Donde la presión p es la variable conjugada del volumen V y la magnetización M es la variable conjugada del campo magnético aplicado H .

En resumen, a modo de comparación, se muestran las principales cantidades termodinámicas y terminologías asociadas con los fluidos y materiales magnéticos en la figura 1.

Partition function

(a) Cantidad termodinámicas asociadas a una material magnético.

Partition function

(b) Cantidad termodinámicas asociadas a un fluido.

Figura 1: Relación entre las variables termodinámicas a partir de la función de partición para sistema magnético y un fluido. Figura obtenida de [9].

FLUCTUACIONES Y LÍMITE TERMODINÁMICO

Si se considera el caso de la energía interna, la desviación cuadrática media de la energía del valor medio $U = \langle E \rangle$ es la fluctuación de la energía por estar en contacto con un reservorio térmico

$$\langle \Delta E \rangle^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2. \quad (16)$$

Se puede demostrar que esta cantidad está relacionada con la capacidad calorífica C_v . Por definición de la ecuación 7, $\langle E^2 \rangle$ se puede reescribir como

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu}^2 e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}. \quad (17)$$

Entonces,

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right]^2 = \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}. \quad (18)$$

Usando la ecuación 11 se puede eliminar la derivada segunda, como

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{C_v}{k\beta^2}. \quad (19)$$

La desviación estandar de E , ΔE es la raiz cuadrada de la expresión 19.



Para ilustrar con un ejemplo numérico, si se considera un litro de gas en una caja, el calor específico típico en CNPT es de $1\text{J}\text{K}^{-1}$. Las fluctuaciones en la energía son del orden de 10^{-18}J . La energía interna es del orden de 10^{20}J , por lo que las fluctuaciones son de 1 parte en 10^{20} .

Dado que el calor específico es una cantidad extensiva², las fluctuaciones en la energía se comportan como \sqrt{V} donde V es el volumen del sistema. La energía interna, por otra parte, es proporcional a V , entonces el tamaño relativo de las fluctuaciones comparadas con la energía interna decrecen como $\Delta E/E \approx 1/\sqrt{V}$ a medida que el sistema se agranda. En este límite, conocido como **límite termodinámico**, las fluctuaciones pueden ser ignoradas. A esta escala no habrá diferencia entre un sistema aislado de energía E y uno en contacto con un reservorio térmico a la misma temperatura.

² Una cantidad es extensiva si cambia cuando el tamaño del sistema en estudio cambia. En contraste una cantidad intensiva no lo hace. [10]

De manera general para cualquier otra variable termodinámica X , variable conjugada de Y parámetro del sistema, las fluctuaciones cuadradas de la variable X vienen dadas por

$$\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial Y^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial Y}. \quad (20)$$

La cantidad $\partial \langle X \rangle / \partial Y$ que mide la respuesta de X ante cambios en Y es llamada la susceptibilidad de X a Y , usualmente denotada como χ :

$$\chi \equiv \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial Y}. \quad (21)$$

En lo posterior será de interés la susceptibilidad magnética definida como $\chi = \partial M / \partial H$.

EJEMPLO: EL MODELO DE ISING

En ciertos metales como Hierro(Fe) o Níquel(Ni), una fracción de espines de átomos se polarizan espontáneamente en la misma dirección, inclusive sin campo magnético externo aplicado, provocando la aparición de un campo magnético macroscópico. Esto sugiere que el arreglo de espines electrónicos y momentos magnéticos es regular. Siendo no necesariamente de manera simple, como puede observarse en la figura 2. Los arreglos indicados presentan un momento magnético espontáneo llamado **momento de saturación** únicamente cuando la temperatura es menor a una temperatura característica conocida como la **temperatura de Curie**. En este caso se dice que el sistema pasa por una **transición de fase de segundo orden o continua**. Por encima de la temperatura de Curie los espines se encuentran orientados aleatoriamente, produciendo en consecuencia un campo magnético nulo debido al movimiento térmico de los espines [11, 12].

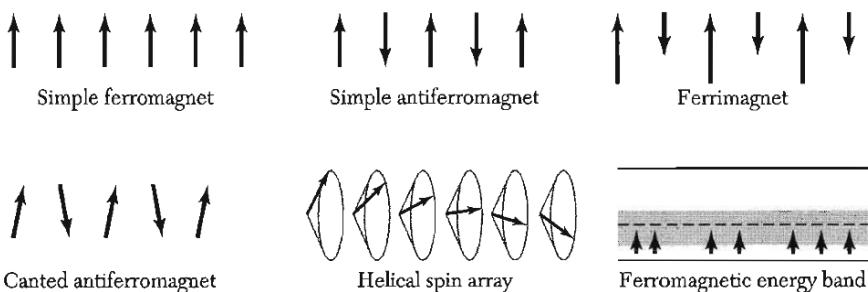


Figura 2: Posibles arreglos regulares de espines en representación de posibles materiales magnéticos.

El modelo de Ising [1], nombrado gracias al físico Ernst Ising, es un modelo matemático que describe materiales magnéticos, como es

el caso de los ferromagnetos y antiferromagnetos simples. El mismo parte de la base de que el magnetismo presente en el material es una combinación de momentos de dipolos magnéticos de muchos espines atómicos en el material. El modelo postula una red de geometría arbitraria, donde un espín se encuentra ubicada en cada lugar del mismo. El valor de los espines puede ser únicamente ± 1 , y las interacciones se replican mediante un término $s_i s_j$. En el caso más simple estas interacciones son de la misma magnitud, denotada por J y entre los espines más cercanos. A su vez, se puede introducir un campo magnético externo H que se acople con los espines. De esta manera el Hamiltoniano toma la forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (22)$$

donde $\langle ij \rangle$ denota suma a primeros vecinos, figura 3. Para valores de J positivos el modelo describe **materiales ferromagnéticos** donde los espines tienden a alinearse entre ellos, mientras que para J negativos el modelo describe **materiales antiferromagnéticos** [11].

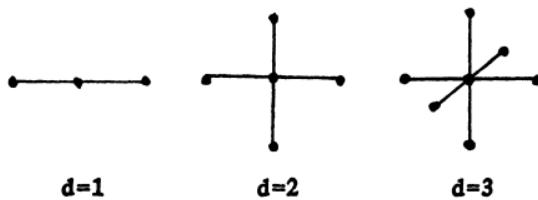


Figura 3: Interacción entre espines a primeros vecinos en una, dos y tres dimensiones.

Los estados del sistema son todos aquellos correspondientes a los distintos valores que pueden tomar los espines. Dado que cada uno puede tomar dos valores, si la red posee N lugares, entonces el sistema tendrá 2^N valores posibles.



¿Cuáles son las principales cantidades termodinámicas de interés para el modelo de Ising y para el trabajo en general?

Se puede calcular la magnetización haciendo un promedio sobre estados

$$\langle M \rangle = \left\langle \sum_i s_i \right\rangle. \quad (23)$$

Aunque uno está más interesado en la magnetización media por espín ya que no depende del tamaño de la red³

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i s_i \right\rangle. \quad (24)$$

Como se dijo anteriormente pueden usarse las fluctuaciones para calcular la susceptibilidad magnética por espín

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (25)$$

Similarmente con el calor específico por espín a partir de las fluctuaciones en la energía

$$c_v = \frac{k\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (26)$$

Por último se mencionará una cantidad importante para estudiar transiciones de fase, capítulo 3, el **cumulante cuarto de Binder** U_4 una función de la magnetización y sus potencias definida como [13, 14]

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}. \quad (27)$$

Las propiedades más importantes del cumulante son que, en el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$, para $T < T_c$ el cumulante tiende al valor $2/3$, para $T > T_c$ el cumulante tiende a cero pasando por un único punto a $T = T_c$. Esta última propiedad es la que la hace sumamente interesante y se utilizará con suma frecuencia.

³ Habrá veces en las que se recurrirá a un abuso de notación obviando los símbolos $\langle \rangle$ pero siempre se estará pensando en un promedio calculando observables como se indicó en el capítulo 2

3

TRANSICIONES DE FASE

Una transición de fase ocurre cuando hay una singularidad en la energía libre o en una de sus derivadas, ver figura 4. Siendo visible un cambio abrupto en alguna de las propiedades de la sustancia. Las transiciones de líquido a gas, de un conductor normal a un superconductor, de un paramagneto a un ferromagneto son ejemplos comunes de ello [9].

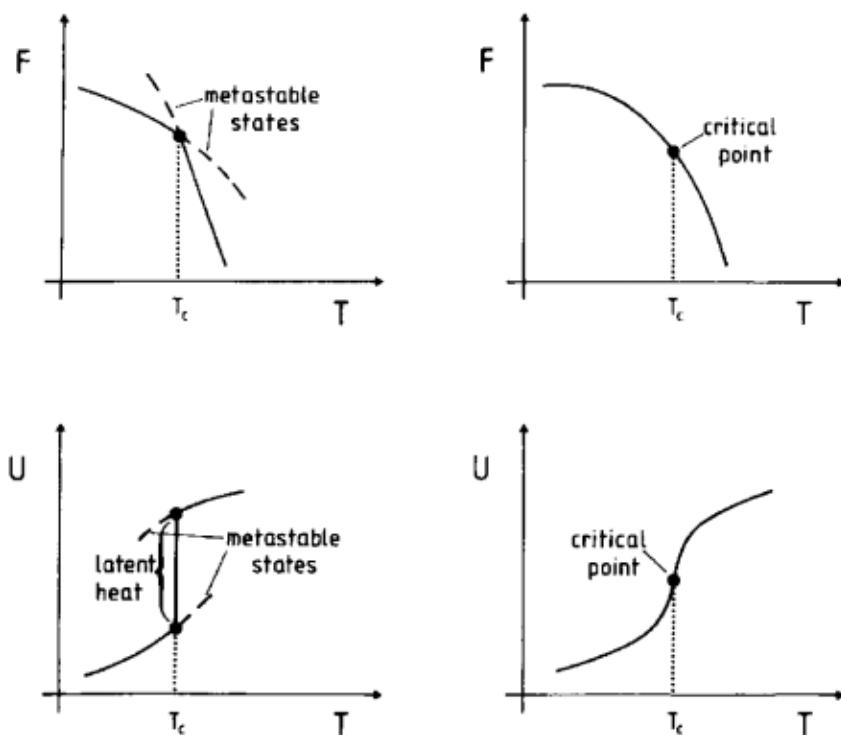


Figura 4: (Izquierda) Dependencia con la temperatura de la energía libre y la energía interna para un sistema en una transición de primer orden. Si hay una discontinuidad finita en una o más de las derivadas primarias del potencial termodinámico apropiado entonces la transición es de primer orden. (Derecha) Dependencia con la temperatura de la energía libre y la energía interna para un sistema en una transición de segundo orden. Si las derivadas primarias son continuas pero las segundas son discontinuas o infinitas entonces la transición será descrita como de segundo orden o continua. Figura obtenida de [15].

TIPOS DE TRANSICIONES DE FASE

Como se mencionó una transición de fase es marcada por una singularidad en un potencial termodinámico como la energía libre, ecuación 13. Si hay una discontinuidad finita en una o mas de las derivadas primeras del potencial termodinámico apropiado entonces la transición es de primer orden, figura 4 (izq.). Para un sistema magnético la energía libre \mathcal{F} es el potencial apropiado con una discontinuidad en la magnetización mostrando que la transición es de primer orden. Para un fluido la energía libre de Gibbs $\mathcal{G} = \mathcal{F} + PV$ es relevante y hay discontinuidades en el volumen y la entropía a lo largo de la curva de presión-vapor, figura 5 (izq.).

Si las derivadas primeras son continuas pero las segundas son discontinuas o infinitas entonces la transición será descrita como de segundo orden o continua, figura 4 (der.). Este tipo de transición corresponde a una susceptibilidad divergente y una longitud de correlación infinita.

La tabla 1 muestra diversos ejemplos de transiciones de fase encontrados en la naturaleza. Tabla obtenida de [9].

Tabla 1: Ejemplos de diversas transiciones de fases encontradas en la naturaleza. Tabla obtenida de [9].

Transición	Ejemplo	Parámetro de orden
ferromagnética [12]	Fe	magnetización
antiferromagnética [12]	MnO	magnetización de la subred
ferrimagnética [12]	Fe ₃ O ₄	magnetización de la subred
estructural [16]	SrTiO ₃	desplazamientos atómicos
ferroeléctrica [16]	BaTiO ₃	polarización eléctrica
orden-desorden [17]	CuZn	concentración atómica de la subred
separación de fases [18]	CCl ₄ + C ₇ F ₁₆	diferencia de concentración
superfluídos [19]	He ⁴ líquido	función de onda condensada
superconductora [20]	Al, Nb ₃ Sn	función de onda fundamental
líquido cristalina [21]	varilla molecular	varias

El diagrama de fases de un fluido típico es mostrado en la figura 5 (izq.). A medida que se varía la presión y la temperatura el agua puede existir como sólido, líquido o gas. Las fronteras separan regiones donde cada estado es estable. Cruzar estas fronteras provoca un salto en la densidad y el calor latente, característicos de transiciones de primer orden.

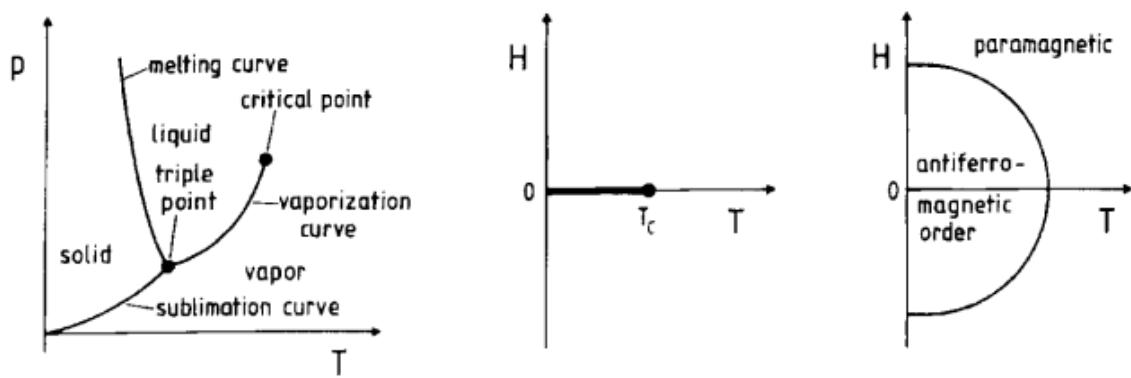


Figura 5: Ejemplos de diagramas de fases. **(Izquierda)** Diagramas de fases simplificado de presión-temperatura del agua. **(Centro)** Diagramas de fases campo magnético-temperatura para un ferromagneto tipo Ising. **(Derecha)** Diagramas de fases campo magnético-temperatura para un antiferromagneto tipo Ising. Figura obtenida de [15].

Si se considera moverse a lo largo de la linea de coexistencia líquido-gas, a medida que crece la temperatura la diferencia en densidades entre el líquido y el gas decrece continuamente hasta volverse cero. Se vuelve cero en el punto crítico a partir de donde se puede mover libremente de manera continua desde un fluido tipo líquido a uno tipo gas, ver figura 6. La diferencia en densidades, que es no nula a temperaturas menor a la crítica, es llamada **parámetro de orden** de la transición líquido-gas.

El parámetro de orden correspondiente a un ferromagneto podría ser la magnetización del sistema, ecuación 24. Mientras que para un antiferromagneto se debería elegir una cantidad que sea sensible a la transición para \leftrightarrow anti. La magnetización útil para ferromagnetos no es en este caso. La misma se detallará en los resultados, capítulo 7.

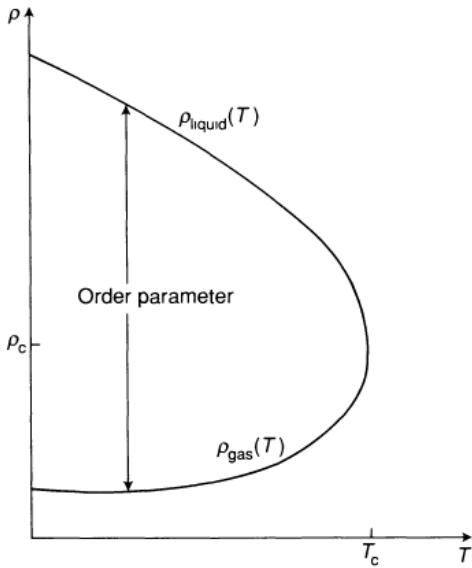


Figura 6: Densidad de un fluido a lo largo de la curva de coexistencia de vaporización. $(\rho_{\text{líquido}}(T) - \rho_{\text{gas}}(T))$ es el parámetro de orden de la transición líquido-gas. Figura obtenida de [9].

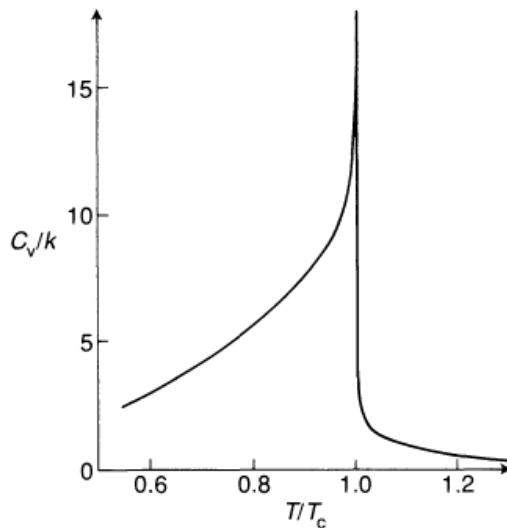


Figura 7: Calor específico del Argón a volumen constante medido en la isocora crítica, $\rho = \rho_c$. La divergencia de la capacidad calorífica es una señal de transición de segundo orden [22]. Figura obtenida de [9]

Un comportamiento análogo es presente en transiciones de fase magnéticas. El diagrama de fase de un ferromagneto simple es mostrado en la figura 5 (centro). Como en el caso de la coexistencia líquido-gas hay una transición de primer orden que termina en un punto crítico.

Cruzar el diagrama de fases a temperaturas menores a la crítica provoca un salto en la magnetización. Por encima de la temperatura crítica es posible moverse continuamente entre un estado de magnetización positiva a otro de magnetización negativa. La magnetización es continua pero su derivada es discontinua. Esto se manifiesta con divergencias en las funciones respuesta, el calor específico y la susceptibilidad.

En la figura 7 se muestra el calor específico del argón medido a lo largo de la isocora crítica $\rho = \rho_c$. Hay una marca de criticalidad: el calor específico diverge y es infinito en dicho punto.

TRANSICIONES DE FASE EN EL MODELO DE ISING FERROMAGNÉTICO

A continuación se describirá con mayor detalle el comportamiento de algunas variables termodinámicas cerca de una transición de fase en el caso de un modelo de Ising ferromagnético con el objetivo de brindar un mayor claridad al asunto.

El diagrama de fases se vuelve a mostrar en la figura 8 (a). Hay una linea de transición de primer orden a campo cero ($H=0$) que va desde temperatura cero hasta una temperatura crítica $T = T_c$.

Primero se describirá la dependencia con el campo externo de la energía libre y sus derivadas: la magnetización y la susceptibilidad, para los caminos señalados como 1,2 y 3 en la figura 8 (a). El objetivó será comparar estas funciones en las tres regiones: debajo, por encima y en $T = T_c$.

La energía libre se muestra en la figura 8 (b). La función es convexa y simétrica alrededor del punto $H=0$. Se desarrolla un pico en $H=0$ para $T < T_c$, lo que marcaría una transición de primer orden, lo cual se verá más claramente para la magnetización.

La variación de la magnetización con el campo externo se muestra en la figura 8 (c). Para $T > T_c$ varía continuamente. Sin embargo, para $T < T_c$ hay una salto en $H=0$ lo que indica una transición de primer orden. A $T = T_c$ la función es continua pero presenta una pendiente infinita a $H=0$.

Derivando nuevamente se obtiene la susceptibilidad χ_T mostrada en la figura 8 (d). Para $T > T_c$ es una función suave en función del campo como es de esperarse. Debajo de T_c presenta un pico en la transición de primer orden para $H=0$. Mientras que en el punto crítico la susceptibilidad diverge, lo cual es un comportamiento característico de una transición de fase continua.

También uno podría estar interesado en como varían tanto la magnetización como la susceptibilidad a campos fijos; caminos 4, 5 y 6 de la figura 8 (a). Estas figuras se muestran en 8 (e) y (f). Notar que no se puede cruzar una linea de transición de primer orden mediante la variación de la temperatura. Siguiendo el camino 5 para $H=0$ se pasa por $T = T_c$ para luego pasar por una linea de coexistencia de dos fases hasta $T=0$. A lo largo de los caminos 4 y 6, equidistantes de $H=0$, no hay una transición de fase.

La dependencia con la temperatura de la magnetización se muestra en la figura 8 (e). Para campos no nulos, la magnetización es una función suave incrementando para temperaturas decrecientes, apuntando todos los espines en la misma dirección que el campo en el límite de temperatura cero.

Para $H=0$ no hay una dirección preferencial marcada por el campo. En el caso de $T > T_c$, es igualmente probable que los espines apunten tanto para arriba como para abajo. De esta manera, la magnetización neta es cero. La magnetización aumenta desde cero a $T = T_c$ hasta un valor de saturación a temperatura cero.

Finalmente en la figura 8 (f) se muestra la susceptibilidad en función de la temperatura. Para campos finitos existe un pico de susceptibilidad en el punto crítico. Mientras que para $H=0$ hay una divergencia marcando el punto crítico.

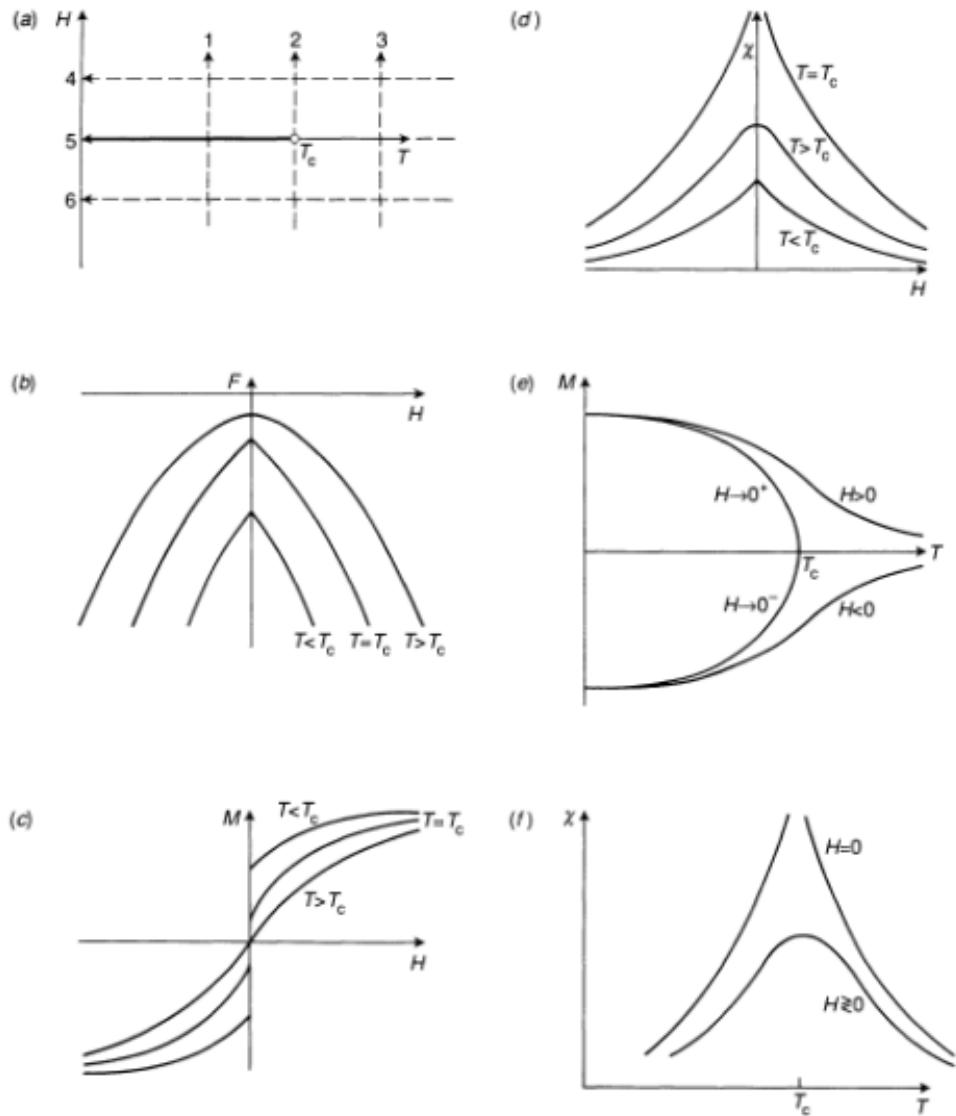


Figura 8: (a) Diagrama de fases de un ferromagneto. Existe una linea de transiciones de primer orden a lo largo de $H=0$ que terminan en $T = T_c$. (b) Dependencia con el campo de la energía libre. (c) Dependencia con el campo de la magnetización. (d) Dependencia con el campo de la susceptibilidad. (e) Dependencia de la magnetización con la temperatura. (f) Dependencia de la susceptibilidad con la temperatura. Figura obtenida de [9].



Ahora uno se podría preguntar si, dado los sistemas mencionados anteriormente en la figura 5, tan diferentes aparentemente como un fluido o un material magnético **¿pueden las transiciones de fase asociarse en un marco teórico común?**

LONGITUD DE CORRELACIÓN

En el modelo de Ising con interacción ferromagnética el sistema tiende a alinear los espines. A temperaturas mucho mayores que la temperatura crítica las contribuciones son debido a fluctuaciones térmicas, aunque hay un pequeño número de vecinos cercanos paralelos, esto es debido a una perturbación aleatoria. A medida que la temperatura baja los efectos de interacción de intercambio son más aparentes. Los vecinos cercanos tienden a alinearse en la misma dirección y grupos de espines alineados o correlacionados aparecen. El mayor tamaño de estos grupos de espines es medido por una cantidad llamada **longitud de correlación** ξ . A temperaturas mayores a la crítica la longitud de correlación es de unos pocos espacios de red. A medida que disminuye la temperatura, la longitud de correlación aumenta. A temperatura crítica la longitud de correlación se vuelve infinita. Estructuras ordenadas existen en cualquier longitud de escala: *Las fluctuaciones en toda escala son importantes.*



Estas fluctuaciones pueden ser observadas macroscópicamente si, por ejemplo, se ilumina un fluido cerca de su temperatura crítica, la luz es reflejada causando que el fluido parezca blanco. Esta fuerte dispersión aparece cuando las fluctuaciones en la densidad son comparables con la longitud de onda de la luz, alrededor de mil veces el espaciado interatómico. Esta opalescencia crítica persiste en toda la región crítica enfatizando que las fluctuaciones en esta longitud de escala permanecen importantes aunque la máxima longitud de escala se incrementa infinitamente.

EXPONENTES CRÍTICOS

Para determinar la forma de las divergencias de las cantidades termodinámicas cerca del punto crítico, se define la variable de escala $t = (T - T_c)/T_c$ como una medida de la desviación de la temperatura respecto de la temperatura crítica T_c . El comportamiento crítico de una función $F(t)$ puede ser descrito como $F(t) \sim |t|^\lambda$ donde λ es el **exponente crítico** asociado a la función. Es importante tener en cuenta que este comportamiento asintótico de $F(t)$ vale para $t \rightarrow 0$.

Notar que este comportamiento presenta un problema si la temperatura crítica es nula $T_c = 0$. Para estos casos se podría redefinir la variable de escala como se verá nuevamente más adelante, sección [6.1](#).

Para un sistema magnético el comportamiento crítico de las cantidades termodinámicas de interés se definen en la tabla [2](#) mientras

que los exponentes para el modelo de Ising en dos y tres dimensiones se muestran en la tabla 3.

Los exponentes críticos no son todos independientes. Por ejemplo, entre otras, se puede demostrar la **desigualdad de Rushbrooke** $\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2$ que se debe satisfacer independientemente de los valores de los exponentes críticos. Por otra parte existe también la **relación de hiperescala** que relaciona los exponentes ν y α con la dimensión d del sistema $d\nu = 2 - \alpha$.

Tabla 2: Definiciones del comportamiento crítico de las principales cantidades termodinámicas de un sistema magnético con temperatura crítica finita $T_c > 0$.

Calor específico	$C_H \sim t ^{-\alpha}$
Magnetización	$M \sim t ^\beta$
Susceptibilidad	$\chi \sim t ^{-\gamma}$
Longitud de correlación	$\xi \sim t ^{-\nu}$

Tabla 3: Exponentes estáticos ($2\beta/\nu$, β y ν) y dinámicos (z y θ) obtenidos a partir del método de la dinámica crítica a tiempos cortos 7.4.2 para el modelo de Ising en 2D y 3D, junto con los resultados exactos del primer modelo. (*) Indica estimación numérica. Tabla obtenida de [23].

		Modelo		
		2D Ising	(exacto)	3D Ising
Exponente	$2\beta/\nu$	0.252(2) [24]	$1/4$	0.517(2) [25]
	β	0.124(5) [24]	$1/8$	0.3273(17) [25]
	$1/\nu$	1.02(4) [24]	1	0.6327(20) [25]
	z	2.166(7) [26]	2.1667(5)* [27]	2.042(6) [25]
	θ	0.191(1) [28]	-	0.108(2) [25]

UNIVERSALIDAD

Estos exponentes críticos son interesantes debido a que son de alguna manera universales para un amplio rango de sistemas dependiendo de un número pequeño de parámetros. Mientras que la temperatura crítica depende sensitivamente de los detalles de las interacciones interatómicas. Estos exponentes dependen de:

- El rango de interacción,
- La dimensionalidad del espacio, d ,
- La simetría del parámetro de orden.

Esto quiere decir que sistemas con iguales valores de exponentes críticos permanecerán a la misma clase de universalidad [29].



El modelo de Ising con interacción a primeros vecinos en dos dimensiones, ecuación 22, en una red cuadrada o triangular, poseerá exponentes críticos idénticos y permanecerán a la misma clase de universalidad.

En el caso del modelo de Ising en tres dimensiones con redes cúbicas simples, cúbicas centrada en el cuerpo y cúbica centrada en las caras su temperatura crítica viene dada por $K_c = kT_c/J = 0,2216, 0,1574$ y $0,1021$ respectivamente. Aunque, en todos los casos el exponente crítico β es el mismo $0,327$ (y, por lo tanto, los restantes exponentes críticos estáticos). [30]

Evidencia empírica de esto fue presentada por Guggenheim en 1945 [31]. Esto se muestra en la figura 9 donde las curvas de coexistencia de distintos fluidos se muestran en unidades reducidas T/T_c y ρ/ρ_c . Como los datos colapsan sobre la misma curva pueden ser descriptos por el mismo exponente crítico β . Ya se detallará más sobre esto en el capítulo 6.

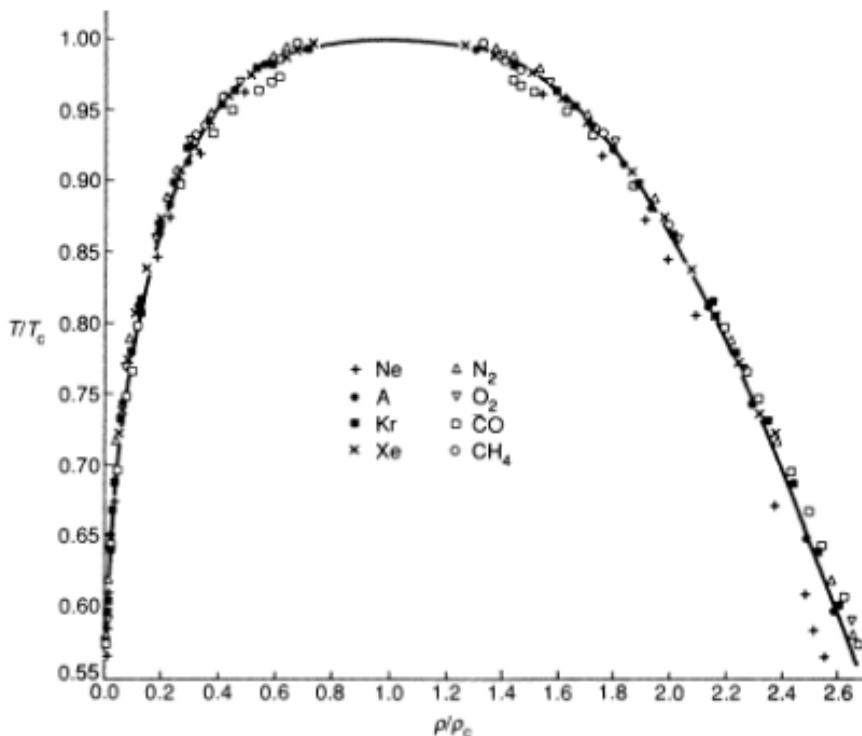


Figura 9: Curva de coexistencia entre ocho fluidos distintos mostrada en función de sus variables reducidas. El ajuste arroja un exponente crítico $\beta = 1/3$. Figura obtenida de [9].

EXponentes dinámicos

Por otra parte, el comportamiento crítico también se hace presente en fenómenos dinámicos, no solo estáticos. La divergencia del tiempo característico del sistema τ está relacionada directamente con la divergencia de la longitud de correlación ξ , mediante la introducción del **exponente crítico dinámico** z y la relación $\tau = \xi^z$, ver tabla 3. Las clases de universalidad estáticas a las que se refirió anteriormente, se pueden subdividir en diferentes **clases de universalidad dinámicas** [32] correspondientes a diversos parámetros z pero con un comportamiento estático común, donde, al acercarse al punto crítico se observan fenómenos distintos de enlentecimiento crítico (o *Critical Slowing Down* en inglés.). Este tema se desarrollará nuevamente en la sección 7.4.2.

4

SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN EQUILIBRIO TÉRMICO



Antes de comenzar la presente sección, uno se podría preguntar **¿Por qué usar simulaciones computacionales y cómo estas se relacionan con un modelo teórico o un experimento?**

Las simulaciones son utilizadas cuando realizar experimentos en sistemas reales es imposible o impracticable. Esto puede ser debido al alto costo de realización o prueba, o debido a que la fragilidad del sistema no soportará pruebas exhaustivas, o porque la duración en tiempo real del sistema lo hace irrealizable [7].

A su vez, en relación al presente trabajo existen sistemas físicos reales que poseen problemas para entender su comportamiento cuando poseen muchas partículas interactuantes en proceso de una transición de fase. Para ello se propone un Hamiltoniano que se cree que contenga las características esenciales del sistema las cuales se puedan determinar mediante simulaciones. En el caso en que las simulaciones estén en desacuerdo con los resultados experimentales, deberá probarse otro Hamiltoniano.

Otra ventaja de realizar simulaciones está relacionada con que diferentes efectos físicos que están simultáneamente presentes en sistemas reales, pueden ser aislados mediante distintas consideraciones en la simulación, proveyendo un mejor entendimiento del sistema.

El objetivo de una simulación no es proveer de un mejor ajuste a los resultados experimentales a lo que lo hace la teoría analítica. El objetivo es crear un entendimiento de las propiedades físicas y procesos tan completos como sea posible, haciendo uso del control de las “condiciones experimentales de la computadora” y la posibilidad de examinar cada aspecto de las configuraciones del sistema en detalle. Resultando en la dilucidación del mecanismo responsable de un determinado fenómeno observado. De esta manera se puede ver la relación entre teoría, experimento y simulación como entidades distintas pero fuertemente relacionadas entre sí, ver figura 10.

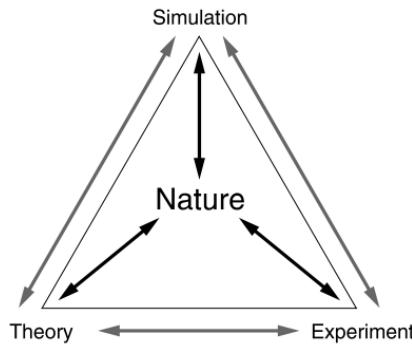


Figura 10: Vista esquemática de la relación entre teoría, experimento y simulación computacional. Imagen obtenida de [15].

EL ESTIMADOR

Usualmente uno está interesado en obtener los valores de expectación $\langle Q \rangle$ de alguna cantidad observable Q , tal como la energía interna en un modelo de gas, o la magnetización en un modelo magnético. Idealmente esto se calcula sumando sobre todos los estados μ del sistema pesados con su correspondiente probabilidad de Boltzmann (ver ecuación 28). Pero este cálculo solo es posible para sistemas pequeños. Para sistemas más grandes, lo mejor que se puede hacer es promediar sobre un subconjunto de todos los estados posibles, lo que introduce alguna inexactitud en el resultado. Las técnicas de Monte Carlo permiten elegir este subconjunto al azar a partir de una distribución de probabilidad p_μ que se especifique.

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}. \quad (28)$$

Suponiendo que se elige un subconjunto de M estados $\{\mu_1, \dots, \mu_M\}$, entonces el mejor estimador de Q vendrá dado por

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}, \quad (29)$$

donde Q_M es llamado el **estimador** de Q . Tiene como propiedad que, a medida que aumenta el número de estados considerados este se vuelve más exacto y cuando $M \rightarrow \infty$ se tiene que $Q_M \equiv \langle Q \rangle$.



Entonces, ¿cómo se eligen estos M estados de manera que Q_M difiera lo menos posible de $\langle Q \rangle$? En otras palabras, ¿cómo se elige a p_{μ} ?

La elección más simple sería la de elegir a los estados equiprobables. Sustituyendo en la ecuación 29 se obtiene

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M e^{-\beta E_{\mu_j}}}. \quad (30)$$

Pero generalmente esta elección es muy pobre.



Por ejemplo, un modelo de Ising 2D con geometría cuadrada con un tamaño pequeño de 20x20 posee $2^{400} \sim 10^{120}$ estados, mientras que una computadora personal convencional en un par de horas puede realizar aproximadamente 10^{12} operaciones.^a Es decir, que se estarán tomando como muestras únicamente 1 entre 10^{108} estados del sistema.

^a Un procesador de PC convencional es de 3GHz = $3 * 10^9$ Hz. Es decir que realiza $3 * 10^9$ operaciones por segundo. En un hora ($\sim 3 * 10^3$ seg), realizará $3 * 10^{12}$ operaciones.

La razón de esta elección tan poco conveniente es que en estas circunstancias un número pequeño de estados serán los que dominen las sumas que aparecen en la ecuación 28, con todos los estados restantes contribuyendo una cantidad despreciable inclusive al sumarlos todos juntos. Esto puede ser notorio a bajas temperaturas, donde no se posee energía térmica para llevar al sistema a estados de energía excitados. Es por ello que el sistema permanece la mayor parte del tiempo en el estado fundamental o en alguno de los estados excitados más bajos.

La idea detrás del método de **Monte Carlo** es elegir estos estados que contribuyen mayoritariamente a la suma en la ecuación 28 e ignorar los restantes para, de esta manera, obtener un buen estimador de $\langle Q \rangle$ con un número relativamente pequeño de estados. La técnica de elegir estados importantes a partir de un número muy grande de posibilidades es llamada **muestreo de importancia**.

MUESTREO DE IMPORTANCIA

Como se demostró anteriormente, un sistema no pasa por todos los estados del sistema con la misma probabilidad, sino de acuerdo a la distribución de probabilidad de Boltzmann (ver ecuación 31).

$$p_{\mu} = Z^{-1} e^{-\beta \mu} \quad (31)$$

Es por ello que en lugar de elegir M estados de manera que cada uno sea igual de probable de ser elegido que cualquier otro, estos son elegidos de manera que la probabilidad de un estado particular μ sea

elegido mediante la ecuación 31. De esta manera el estimador de $\langle Q \rangle$, ecuación 29, toma la forma

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} \quad (32)$$

Se puede notar que esta elección es adecuada cuando el sistema pasa la mayor parte del tiempo en un número pequeño de estados.



Quedaría preguntarse **¿cómo se eligen los estados de tal manera que cada uno aparece con su correcta distribución de probabilidad?**

Esto es respondido por el **Proceso de Markov**.

Proceso de Markov

Para empezar, no se puede elegir estados aleatoriamente e ir aceptándolos o rechazándolos con una probabilidad proporcional a $e^{-\beta \mu}$. Esto no es mejor que lo propuesto inicialmente ya que se terminarían descartando la mayoría de los estados, ver figura 11.

Un proceso de Markov es un mecanismo que, dado un sistema en un estado μ , genera un nuevo estado de ese sistema ν . No generará el mismo estado cada vez que le es dado el estado inicial μ . La probabilidad de generar un estado ν dado μ es llamada la **probabilidad de transición** $P(\mu \rightarrow \nu)$ para la transición de μ a ν . En un verdadero proceso de Markov estas transiciones de probabilidad deberán satisfacer dos condiciones: (1) no variar con el tiempo y (2) depender únicamente de las propiedades de los estados en consideración μ y ν , y no de algún otro estado. A su vez, deberán satisfacer la condición

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1, \quad (33)$$

dado que un proceso de Markov debe siempre generar un estado ν dado un sistema en estado μ . Notar también que la probabilidad de transición de $P(\mu \rightarrow \mu)$, que es la probabilidad de que el nuevo estado generado sea el mismo que el inicial, es distinta de cero. Es decir, que existe una probabilidad no nula de que el proceso de Markov permanezca en el estado μ .

En las simulaciones Monte Carlo se utilizan procesos de Markov repetidamente para generar una **cadena de Markov** de estados. Es decir, dado un estado μ , este proceso genera un estado nuevo ν , luego este otro λ y así sucesivamente. El proceso de Markov es elegido de manera que, cuando es corrido en un tiempo lo suficientemente largo, producirá una sucesión de estados que aparecen con una probabilidad dada por la distribución de Boltzmann, ecuación 31. El proceso de alcanzar esta distribución es llamado *llegar o alcanzar el equilibrio*.

Para llegar a todo esto, se van a pedir que los procesos de Markov cumplan dos condiciones adicionales ergodicidad y balance detallado.

Ergodicidad

La condición de ergodicidad es un requerimiento que impone que debe ser posible para cualquier proceso de Markov alcanzar cualquier estado del sistema desde cualquier otro estado, si se deja transcurrir un tiempo lo suficientemente largo. Cada estado ν aparece con una probabilidad no nula p_ν en la distribución de Boltzmann, y si ese estado fuera inaccesible desde un estado μ , la probabilidad sería cero y no la deseada.

La condición de **ergodicidad** estipula que es posible tomar algunas probabilidades de transición del proceso de Markov igual a cero, pero que debe haber al menos un camino de probabilidad de transición no nula entre cualquier dos estados que se elija. En la práctica los algoritmos de Monte Carlo eligen casi todas las probabilidades de transición iguales a cero, pero teniendo en cuenta que esta condición de ergodicidad no sea violada.

Balance detallado

Esta condición es la que se asegura que al llegar al equilibrio se genera una distribución de probabilidad de Boltzmann y no cualquier otra distribución. Para ello notar que cuando un sistema está en equilibrio, la taza de cambio en la que el sistema realiza transición hacia y desde el estado μ es igual. Matemáticamente esto se puede expresar como

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (34)$$

Usando la ecuación 33 se puede simplificar

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (35)$$

Desafortunadamente esto no garantiza que se alcance la distribución de probabilidad deseada. Para ello se debe proponer una condición adicional:

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (36)$$

Esta es la condición de **balance detallado**. El lado izquierdo de la ecuación indica el ritmo total en el que ocurren transiciones μ a ν en el sistema, mientras que el lado derecho indica el ritmo de la transición inverso. Es decir, que la condición de balance detallado dice que en promedio el sistema realiza una transición de μ a ν tanto como de

ν a μ . Dicho esto, se puede elegir una distribución de probabilidad de estados generada por la cadena de Markov que tienda a cualquier distribución p_μ deseada. Si se quiere que la distribución en equilibrio sea la de Boltzmann, la ecuación 36 satisfacerá para las probabilidades de transición

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (37)$$

Esta ecuación junto con la ecuación 33 son las ligaduras de la elección de $P(\mu \rightarrow \nu)$. Una elección válida podría ser la de

$$P(\mu \rightarrow \nu) \propto e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\mu - E_\nu)}, \quad (38)$$

pero no es muy buena. Una elección estándar y que funciona bastante bien es la conocida como algoritmo de Metrópolis que se tratará en el capítulo 5.

Tasa de aceptación

Un pequeño resumen sobre como construir el algoritmo de Monte Carlo sería que dado un conjunto de probabilidades de transición $P(\mu \rightarrow \nu)$ satisfaciendo las condiciones 33 y 37, se construye un proceso de Markov que genere los estados con exactamente esas probabilidades y en consecuencia producir una cadena de estados con la correcta probabilidad de Boltzmann. Sin embargo, usualmente no es tan trivial determinar el proceso de Markov apropiado para generar las probabilidades de transición requeridas, pudiendo ser muchas veces cuestión de prueba y error. Para algunos problemas se puede utilizar el algoritmo de Metrópolis, pero para muchos problemas esta no es una solución. El hecho de introducir la **tasa de aceptación** permitirá elegir cualquier algoritmo que genere nuevos estados e inclusive obtener el conjunto de probabilidades de transición requeridas.

Básicamente la idea se basa en que las probabilidades de transición se pueden modificar de tal manera de tomar cualquier valor al modificar los valores de $P(\mu \rightarrow \mu)$. Para ello si se separa la probabilidad de transición en dos partes

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu). \quad (39)$$

La cantidad $g(\mu \rightarrow \nu)$ es llamada **probabilidad de selección**, el cual es la probabilidad de que, dado un estado inicial μ , el algoritmo genere un nuevo estado ν , mientras que $A(\mu \rightarrow \nu)$ es la tasa de aceptación. Esta tasa dice que si el sistema se encuentra en un estado μ y pasa a un estado ν , se deberá aceptar ese estado y cambiar al nuevo estado ν una fracción de tiempo $A(\mu \rightarrow \nu)$. El resto del tiempo se debería permanecer en el estado μ . Esta tasa toma valores entre cero

y uno; elegir cero implicaría que $P(\mu \rightarrow \mu) = 1$ provocando que el sistema permanezca siempre en el estado μ .

Dicho esto, hay una libertad de elección de las probabilidades de transición $P(\mu \rightarrow \nu)$ ya que la condición 37 solo fija el cociente $A(\mu \rightarrow \nu)/A(\nu \rightarrow \mu)$:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)}. \quad (40)$$

El cociente $A(\mu \rightarrow \nu)/A(\nu \rightarrow \mu)$ puede tomar valores entre 0 e infinito. De esta manera para crear un algoritmo de Monte Carlo, basta con elegir un mecanismo que cree nuevos estados ν a partir de un estado μ , con un conjunto de probabilidades $g(\mu \rightarrow \nu)$ que luego se aceptan o no con una probabilidad $A(\mu \rightarrow \nu)$.

5

EL ALGORITMO DE METRÓPOLIS

MODELO A ESTUDIAR

En la presente sección se introducirá el Hamiltoniano del sistema a estudiar por una cuestión de claridad y particularidad del algoritmo que se describirá a lo largo del capítulo.

El modelo a simular en cuestión consta de dipolos o espines s_i ubicados en un sitio i de una red cuadrada de lado L con geometría también cuadrada. Cada sitio debe estar ocupado únicamente por un espín. Cada espín puede tomar dos valores $+1$ o -1 . Si hay N sitios en la red entonces el sistema puede estar en uno de los 2^N estados, y la energía de un estado en particular va a estar dada por el Hamiltoniano de la ecuación 41.

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i, \quad (41)$$

donde

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} \alpha_{\uparrow\downarrow}, & \text{si } s_i \neq s_j \\ 1, & \text{caso contrario} \end{cases}$$

es la constante de interacción entre primeros vecinos $\langle ij \rangle$ y H es un campo magnético externo. En particular, salvo que se especifique lo contrario, se tratará el caso $H=0$.

INTRODUCCIÓN AL ALGORITMO

El **algoritmo de Metrópolis** fue introducido por Nicolás Metrópolis en 1953 [33]. A continuación se explicará como se implementó dicho algoritmo, como determinar cuando el sistema está en equilibrio, la medición de valores de expectación y el cálculo de errores.

Primero, se considerará a $g(\mu \rightarrow \nu)$, el conjunto de probabilidades introducido en la sección anterior, mediante la inversión de un espín al azar. Esto se conoce como **dinámica de inversión de un espín singular**. Esta elección es independiente del algoritmo de Metrópolis. El algoritmo seguirá siendo de Metrópolis aunque se elija otra dinámica como por ejemplo inversión de bloques de espines. Usando esta dinámica es trivial notar que el algoritmo sigue obedeciendo la condición de ergodicidad, es decir, que todos los estados del sistema son alcanzables. Cualquier estado puede ser obtenido a partir de otro mediante la inversión de cualquiera de sus espines.

En el algoritmo de Metrópolis las probabilidades de selección $g(\mu \rightarrow \nu)$ para cada uno de los estados posibles ν se eligen iguales. La probabilidad de selección de los restantes estados se elige igual a cero. Dado un sistema en un estado μ hay N estados ν que se pueden obtener a partir de este mediante la inversión de un espín en particular. Es por ello que la probabilidad de selección de cada uno de estos N estados es

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}.$$

La condición de balance detallado, ecuación 36, toma la forma

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}.$$

Ahora queda por elegir la tasa de aceptación $A(\mu \rightarrow \nu)$ que satisfaga esta ecuación. Como se dijo anteriormente una posibilidad es elegir

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\mu - E_\nu)} \quad (42)$$

quedando por determinar A_0 de tal manera que las tasas $A(\mu \rightarrow \nu)$ sigan siendo probabilidades menores a uno y que los nuevos estados aceptados sean lo mayor posibles. El inconveniente con esta elección es que no es muy eficiente, la mayoría de los nuevos estados generados no serán aceptados. Dicho esto conviene elegir:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)} & , \text{ si } E_\mu - E_\nu > 0 \\ 1 & , \text{ caso contrario.} \end{cases} \quad (43)$$

Un gráfico de esta cantidad se muestra en la figura 11. La linea sólida muestra la ecuación 42 mientras que la punteada representa la tasa de aceptación de la ecuación 43.

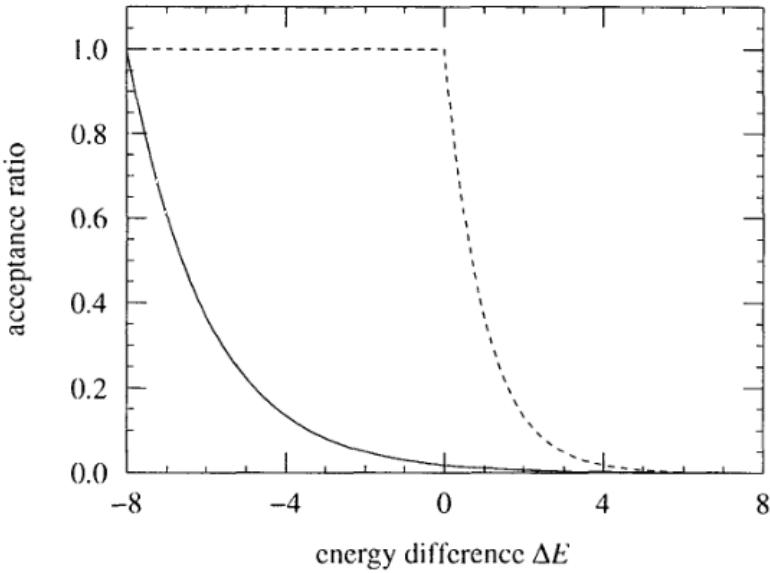


Figura 11: Tasa de aceptación: linea sólida muestra la ecuación 42. Esta muestrea la distribución de Boltzmann correctamente pero es muy ineficiente debido a que no acepta la mayoría de las nuevas configuraciones. La tasa de aceptación de Metrópolis (linea punteada), ecuación 43, es mucho más eficiente. Imagen obtenida de [7].

IMPLEMENTACIÓN DEL ALGORITMO DE METRÓPOLIS

En la simulación se utilizaron condiciones periódicas de contorno, donde un espín del borde de la red interactúa a primeros vecinos, figura 3, según la ecuación 41. Esta interacción es de la forma $-\alpha_{ij}s_i \cdot s_j$. En dos dimensiones este término debería corresponderse entre el espín s_i y los espines ubicados tanto arriba como abajo y a los costados del mismo. Pero al estar ubicado en un borde esto no será posible. La solución a este problema es haciéndole corresponder un espín del borde opuesto para que interactúen como si estuvieran a primeros vecinos, ver figura 12. Esto asegura que los espines tienen el mismo número de vecinos (en condiciones periódicas de contorno a primeros vecinos este número es 4) y geometría local, no habiendo bordes especiales con propiedades distintas al resto; todos los espines son equivalentes y se dice que el sistema es invariante traslacional. En la práctica, esto mejora la calidad de los resultados en la simulación. [7] Otras condiciones de contorno regularmente utilizadas durante simulaciones son mostradas en la figura 13.

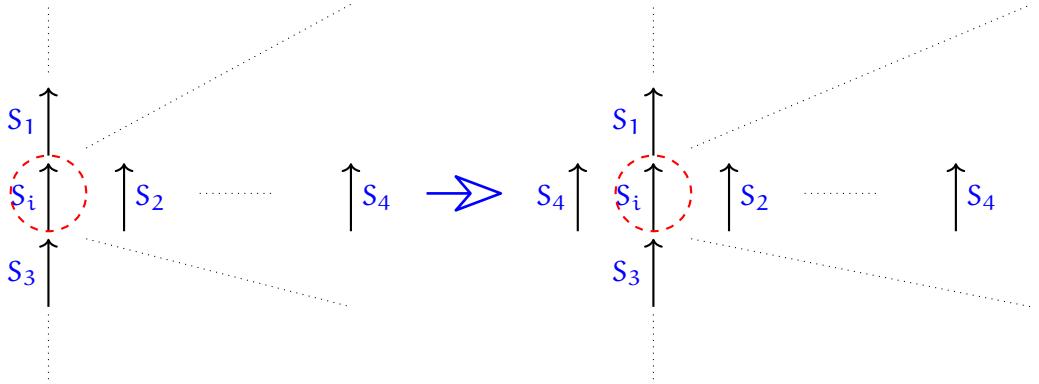


Figura 12: Efecto de las condiciones periódicas de contorno sobre un espín s_i en el borde de una red de dos dimensiones. Este espín interactúa de la forma $-\alpha_{ij} s_i \cdot s_j$ con los primeros vecinos s_1, s_2 y s_3 , dado por el Hamiltoniano de la ecuación 41. Al no haber un espín del lado izquierdo de s_i , las condiciones de contorno periódicas simulan que interactúa de la misma manera que los espines anteriores pero correspondiéndole un espín del borde opuesto, en este caso, s_4 de la forma $-\alpha_{ij} s_i \cdot s_4$. Para espines ubicados en otro borde de la red el comportamiento será análogo.

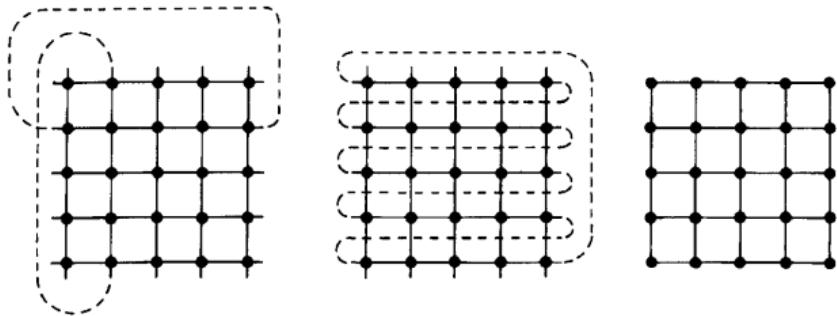


Figura 13: Condiciones de contorno usuales en una red cuadrada: **(Izquierda)** Condiciones de contorno periódicas. **(Centro)** Condiciones de contorno periódicas helicoidales. **(Derecha)** Condiciones de contorno libres. Figura obtenida de [15].

Luego se debe elegir alguna temperatura en la cual inicializar el sistema. En la mayoría de los casos esto no afecta el resultado final, sino el tiempo en el que tarda el sistema en llegar al equilibrio. Los estados iniciales más utilizados son a temperatura infinita y a temperatura cero. A temperatura cero el sistema se encuentra en su estado fundamental, mientras que a temperatura infinita el sistema se encuentra orientado aleatoriamente o de manera no correlacionada.

Aunque en el caso de realizar simulaciones en un conjunto de temperaturas se puede utilizar el estado final de una corrida anterior como el nuevo estado para la nueva corrida. Por ejemplo, si se utilizan temperaturas entre $T=1.0$ y 2.0 en pasos de 0.1 (se mide la tem-

peratura en unidades de energía tal que la constante de Boltzmann $k_B = 1$). Entonces, utilizando inicialmente un estado a temperatura cero el sistema se simula a $T=1.0$. El estado del sistema final se utiliza para correr ahora a una temperatura $T=1.1$ y así sucesivamente hasta llegar a $T=2.0$.

El siguiente paso sería generar un nuevo estado v mediante la inversión de un espín aleatorio y calcular la diferencia de energía entre el nuevo estado y el anterior $E_v - E_\mu$. Este cambio se aceptará en base a la ecuación 43. Es decir que en el caso de que $E_v - E_\mu \leq 0$ se aceptará el cambio automáticamente, mientras que si $E_v - E_\mu > 0$ se aceptará con una probabilidad $e^{-\beta(E_\mu - E_v)}$. Esto se puede hacer, sorteando un número aleatorio r y aceptar el cambio si $r < e^{-\beta(E_\mu - E_v)}$.

Luego el algoritmo repite constantemente este procedimiento de elegir un espín, calcular el nuevo estado del espín invertido, calcular la diferencia de energía y aceptarla de acuerdo con la ecuación 43.

En la figura 14 se muestra un diagrama de bloques representando la implementación del algoritmo de Metrópolis.

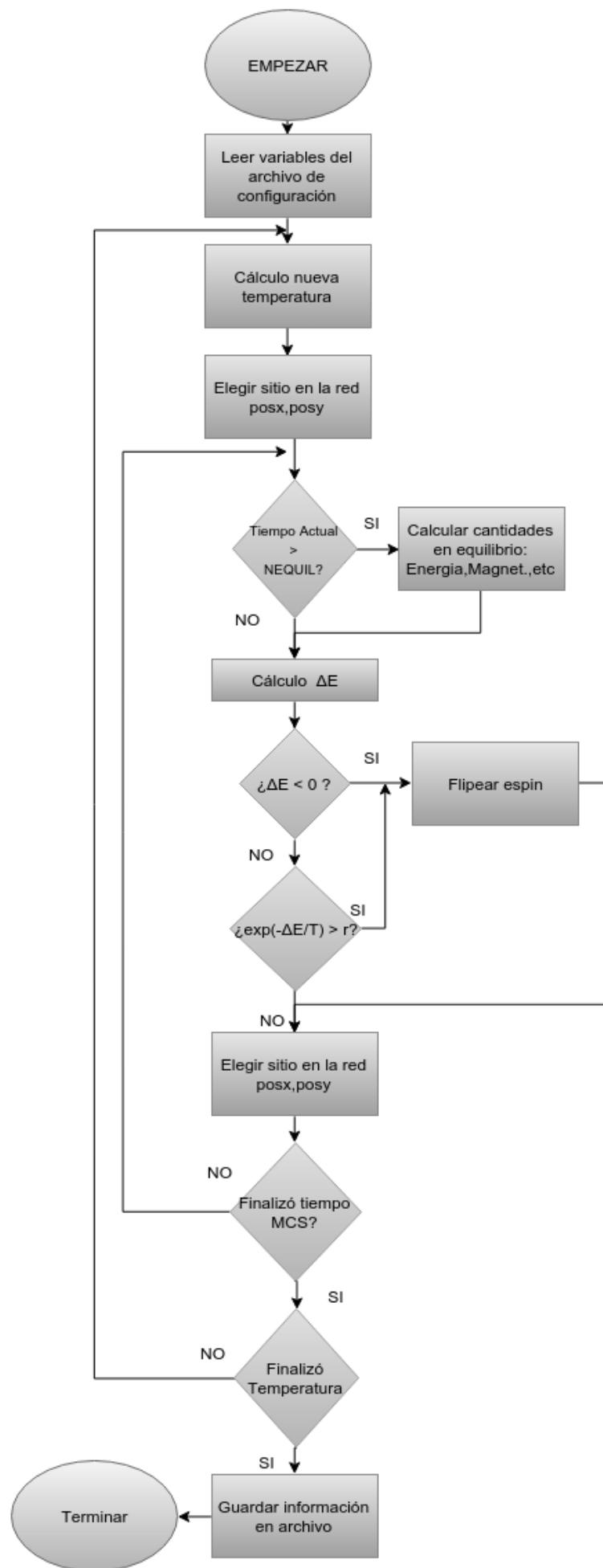


Figura 14: Diagrama de bloques que representa la implementación del algoritmo de Metrópolis.

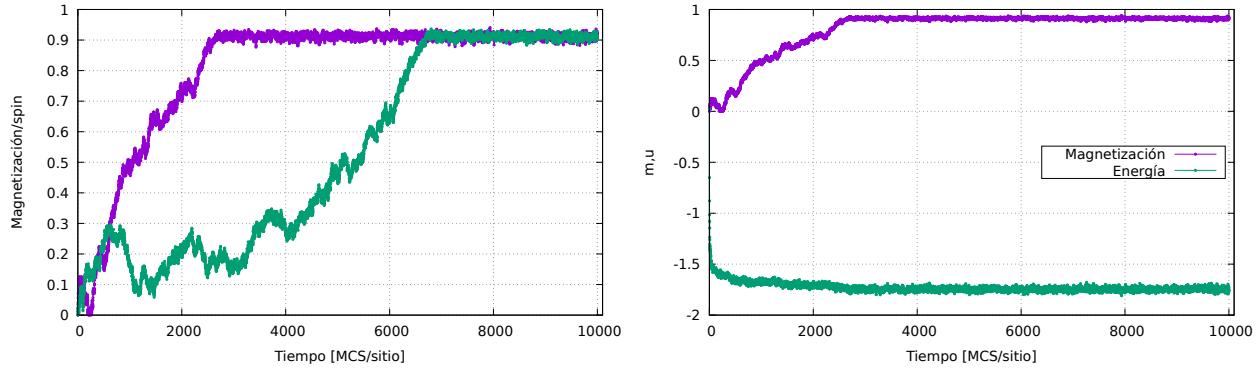
EQUILIBRIO



Dado que se está interesado en calcular cantidades termodinámicas en el equilibrio, uno se podría preguntar **¿cuándo es que se llega al equilibrio? o, ¿cómo varían estas cantidades en función de la temperatura?**

Para determinar si el sistema llegó al equilibrio hay varias maneras de hacerlo. Una manera simple sería analizar como varían diversas cantidades termodinámicas en función del tiempo en una corrida, figura 15b. Pero esto tiene como contraproducente que el sistema podría caer en un mínimo local de energía y llegar a un pseudoequilibrio. Para evitar esto se podrían realizar varias simulaciones de una cantidad termodinámica en función del tiempo con distintas condiciones iniciales, figura 15a, por ejemplo, una que empiece a $T=0$ y otra a $T = \infty$, o dos corridas a temperatura inicial infinita con semillas para números aleatorios distintas, y determinar el tiempo para el cual ambas convergieron al mismo valor. Este tiempo τ_{eq} es llamado **tiempo de equilibrio**. En el caso de elegir una cantidad termodinámica se suele utilizar la magnetización ya que su tiempo de equilibrio es mayor que la de la energía.

En la figura 15 se muestra como eje temporal **MCS/sitio, pasos de Monte Carlo por sitio**, definiéndola como unidad temporal. Esta se define como el hecho de recorrer N elementos (algunos espines pueden ser elegidos varias veces y otros ninguna) donde la frecuencia de elección de un espín es en promedio la unidad. Notar que esto permite poder comparar redes de distinto tamaño. En la figura 16 se muestran las instantáneas correspondientes al modelo de Ising con $\alpha_{\uparrow\downarrow}=1$ llegando al equilibrio a una temperatura $T = 2,4T_c$ iniciado a partir de una temperatura nula. El sistema llega al equilibrio en la última figura.



(a) Magnetización por espín para dos corridas distintas desde $T=\infty$ hasta $T=1.5$. La diferencia entre las dos es una semilla distinta utilizada en el generador de números aleatorios. Ambas magnetizaciones convergen al mismo valor para $t=7000$ MCS/sitio aproximadamente.

(b) Magnetización (curva superior) y la energía (curva inferior) por espín para una red de 100×100 del modelo de Ising usual con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ utilizando el algoritmo de Metrópolis. El sistema fue iniciado a una temperatura $T=\infty$ y enfriado hasta el equilibrio a $T=1.5$.

Figura 15: Gráficos correspondientes a una red de 100×100 para el modelo de Ising usual $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ sobre la medición de cantidades termodinámicas de interés con la finalidad de determinar el tiempo de equilibrio del sistema, τ_{eq} .

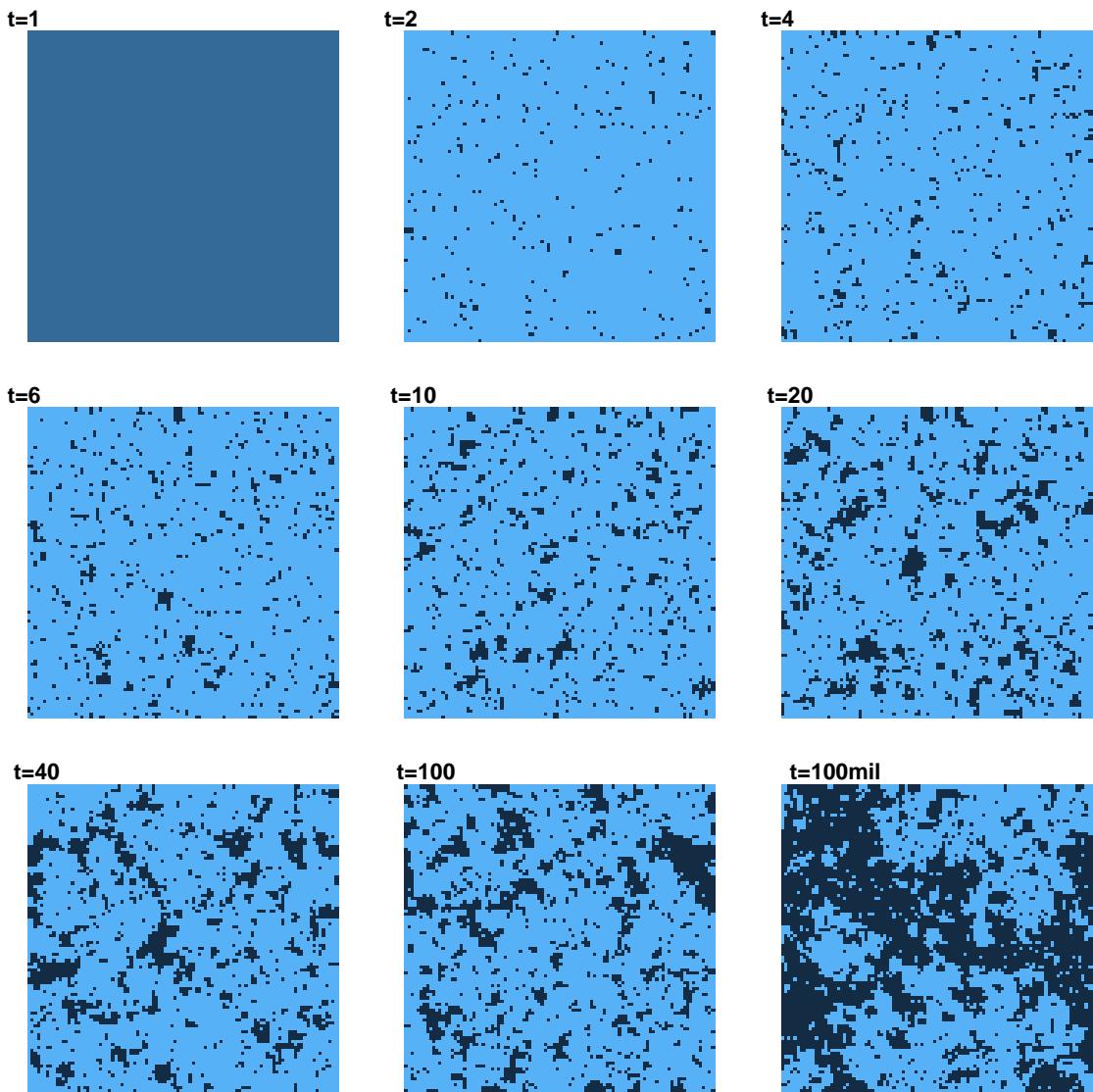


Figura 16: Instantáneas de una red 100×100 correspondiente al modelo de Ising usual con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ iniciado a temperatura cero llegando al equilibrio a una temperatura $T = 2,4T_c$ usando el algoritmo de Metrópolis. Los dos colores representan a espines ± 1 . Los tiempos correspondientes a cada instantánea se indican en la figura. En la última el sistema llegó al equilibrio.

MEDICIÓN EN EL EQUILIBRIO

El siguiente paso consiste en preguntarse como calcular las distintas cantidades termodinámicas de interés.

Para calcular la energía se podría evaluar directamente el Hamiltoniano, ecuación 41, con los valores de espín correspondientes sin ser muy eficiente. Una mejor manera sería calcular la energía de un nuevo estado es, a partir del estado anterior conocido, utilizando la

variación de energía $E_v = E_\mu + \Delta E$. Entonces la energía del sistema se calcula únicamente al inicio de la simulación y, luego, cada vez que se invierte un espín, se modifica la energía usando el valor de ΔE .

Por otra parte la magnetización total del sistema en un estado μ viene dada por

$$M_\mu = \sum_i s_i^\mu.$$

La variación de energía de un estado μ a uno v viene dada por

$$\Delta M = M_v - M_\mu = \sum_i s_i^v - \sum_i s_i^\mu = s_k^v - s_k^\mu = 2s_k^v.$$

De aquí que conviene calcular la magnetización en un principio y luego utilizar

$$M_v = M_\mu + \Delta M = M_\mu + 2s_k^v \quad (44)$$

cada vez que se invierte un espín.

Entonces, ya en equilibrio, dada la magnetización y la energía en un conjunto de tiempos determinados se puede promediar para obtener el estimador de la energía interna y la magnetización. Luego dividiendo estas cantidades por el numero de sitios en la red N permite obtener la energía interna y la magnetización promedios por sitio.

De la misma manera se puede promediar los cuadrados de la magnetización y la energía interna para obtener cantidades como el calor específico y la susceptibilidad magnética, ecuaciones 26 y 25.

Por último quedaría por determinar cuánto tiempo correr el programa para promediar estas cantidades y obtener un buen estimador. Lo que uno se debe asegurar es que las medidas a promediar sean independientes entre si. Una forma simple sería ver la figura 15b y estimar el tiempo necesario o, una mejor manera, sería a partir del cálculo del tiempo de correlación τ esto es, en cuanto tiempo un estado pasa a otro significativamente distinto. Una suposición es considerar a este tiempo como el tiempo de equilibrio τ_{eq} definido previamente. Generalmente suele ocurrir que $\tau_{eq} > \tau$ por ende la suposición realizada no presenta inconveniente alguno.

CÁLCULO DE ERRORES

Luego de que se sabe como calcular los promedios uno se puede preguntar que tan buenos son estos resultados. En el caso de simulaciones del tipo Monte Carlo se tienen dos tipos de errores:

- **errores estadísticos:** provienen como un resultado de los cambios aleatorios en un sistema pudiendo ser estimados efectuando varias medidas y calculando la desviación de estos valores.

- **errores sistemáticos:** errores debido al procedimiento realizado al hacer medidas. Un ejemplo sería debido a esperar un tiempo finito a que el sistema se equilibre. Idealmente se esperaría un tiempo infinito para que esto suceda.

Estimación de errores estadísticos

Una manera de determinar los errores sería, si se considera una simulación con n medidas de por ejemplo, la magnetización por espín m_i , el mejor estimador será el valor medio \bar{m} y el mejor estimador de la desviación estándar viene dada por

$$\sigma = \sqrt{\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n (m_i - \bar{m})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{1}{n-1} (\bar{m^2} - \bar{m}^2)}. \quad (45)$$

Este método asume que las n muestras m_i son independientes entre sí, aunque en general no lo serán.

Se podría corregir la ecuación 45 por otra que tenga en cuenta que las mediciones no son independientes modificando el número de muestras n como mostró [34] obteniendo

$$\sigma = \sqrt{\frac{1 + 2\tau/\Delta t}{n-1} (\bar{m^2} - \bar{m}^2)} \quad (46)$$

donde τ es el tiempo de correlación y Δt el intervalo de tiempo en el que fueron medidas las muestras. Esta ecuación en el límite $\Delta t \gg \tau$ se vuelve la ecuación 45 que es lo esperado.

OTROS MÉTODOS En algunos momentos el método mencionado anteriormente no es aplicable. Esto sucede cuando un resultado no se obtiene a partir de la medición a lo largo del tiempo de la simulación. Este es el caso por ejemplo de la capacidad calorífica c , que es el promedio de una cantidad macroscópica. No se define en un tiempo específico. Sino que está definido en término de promedios de varias medidas de E y E^2 . Los métodos a utilizar en este caso podrían ser: **bloques, jackknife o bootstrap**.

El **método de bloques** propone dividir las medidas hechas por ejemplo de la energía realizadas durante la simulación en varios grupos (o bloques). Luego calcular la capacidad calorífica separadamente para cada uno de los grupos y utilizar estos valores para obtener un error. Sin embargo, este error depende del número de bloques que se definan, lo que lo hace un método no demasiado riguroso.

El **método de bootstrap** consiste en, dados los n elementos de energía medidos no necesariamente independientes unos de otros, elegir n elementos con repetición al azar. Luego calcular el calor específico de estos valores y se repite el proceso eligiendo n valores al azar

de la muestra original. Luego de realizar esto sucesivas veces [35] la desviación estándar viene dada por

$$\sigma = \sqrt{c^2 - \bar{c}^2}. \quad (47)$$

Este método posee la desventaja de que no es ampliamente aceptado para obtener un valor correcto.

El **método jackknife** a diferencia del bootstrap exige elegir n elementos de energía independientes. Primero se calcula la capacidad calorífica con los n elementos. Luego, para calcular los restantes valores c_i se remueve un elemento de los n, dejando $n-1$ y se obtiene c_1 . Luego el que se eliminó se vuelve a agregar al subconjunto anterior pero se elimina otro elemento y se obtiene c_2 y así sucesivamente. La desviación estándar es entonces

$$\sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^n (c_i - c)^2} \quad (48)$$

donde c es el estimador usando el conjunto de n elementos.

Tanto bootstrap como jackknife obtienen un buen resultado para un conjunto de datos grande, del orden de 100 para una precisión del 10 %. Si n es mucho más grande que 100, el método de bootstrap es probablemente el más eficiente. Caso contrario, es recomendable el jackknife. [35]

Estimación de errores sistemáticos

Como se dijo anteriormente la principal fuente de errores sistemáticos es debida a esperar un tiempo finito entre medidas del sistema para esperar a que equilibre. A diferencia de los errores estadísticos, no existe un método para estimar estos errores. Otra fuente de error sistemático sería no esperar tiempos suficientemente grandes entre medidas independientes de cantidades de interés.

FLUCTUACIONES CRÍTICAS Y ENLENTECIMIENTO CRÍTICO

Generalmente uno está interesado en conocer una región particular cercana al punto crítico llamada **región crítica**, por ejemplo al hacer un estudio mediante el escaleo de tamaño finito, capítulo 6. En esta región el sistema tiende a formar grupos grandes de espines apuntando en la misma dirección de tal manera que la longitud de correlación diverge en el límite termodinámico, mientras que para un sistema simulado de tamaño finito la longitud de correlación puede ser como máximo del orden del tamaño de red. Estos grupos de espines contribuyen considerablemente tanto a la magnetización como a la energía del sistema. Si estos son cambiados de orientación

provocarán grandes fluctuaciones, fenómeno llamado **fluctuaciones críticas**. Dado que las fluctuaciones de la magnetización y la energía están relacionadas con la susceptibilidad y la capacidad calorífica, estas últimas deberían diverger en el límite termodinámico a medida que uno se acerca a la temperatura crítica.

Sin embargo hay un inconveniente con el algoritmo de Metrópolis: no es preciso en la región crítica. Esto se debe a dos razones. La primera tiene que ver con las fluctuaciones críticas. En un sistema simulado de tamaño finito las fluctuaciones nunca divergen realmente pero se vuelven muy grandes provocado grandes errores estadísticos. De acuerdo a lo dicho en la sección 5.6 esto se puede disminuir incrementando el tiempo de simulación para obtener un mayor número de mediciones independientes, ecuación 45. Aunque, en el algoritmo de Metrópolis, el tiempo de correlación τ de la simulación es grande cerca de T_c .

El incremento de las fluctuaciones críticas y por ende del error de nuestra medición es innato al modelo de Ising. Aunque, no se puede decir lo mismo del incremento en el tiempo de correlación. Este efecto es llamado **enlentecimiento crítico** [15]. Diferentes algoritmos pueden tener distintos tiempos de correlación para una dada temperatura. Si uno estuviera particularmente interesado en el comportamiento cercano a la región crítica sería conveniente utilizar un algoritmo que sufra menos enlentecimiento crítico que Metrópolis o que incluso lo elimine por completo.

La divergencia del tiempo de correlación τ se puede escribir como

$$\tau = \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-z\nu}, \quad (49)$$

donde z es el exponente crítico dinámico que permite cuantificar el efecto de enlentecimiento crítico. Diferentes algoritmos tendrán distintos exponentes críticos z . Este exponente no es universal como lo son los exponentes críticos estáticos. Un valor grande de z implica que τ es grande rápidamente siendo la simulación lenta y poco precisa, mientras que un valor pequeño implica relativamente poco enlentecimiento crítico y un algoritmo más rápido cerca de T_c . Si $z = 0$ no hay enlentecimiento crítico. Por otra parte si se escribe la divergencia de la longitud de correlación como $\xi = [(T - T_c)/Tc]^{-\nu}$, combinando con la ecuación 49

$$\tau \sim \xi^z \sim L^z, \quad (50)$$

donde el lado derecho de la ecuación implica un sistema finito de tamaño L .

El algoritmo de Metrópolis posee un exponente dinámico $z = 2,167(1)$ [27]. Otros algoritmos populares pueden ser, por ejemplo, el de Wolff [36], el algoritmo de Swendsen-Wang [37], el algoritmo de Niedermayer

[38], etcétera [32]. En la tabla 4 se comparan los exponentes dinámicos del algoritmo de Metrópolis, Wolff y Swendsen-Wang en 2,3 y 4 dimensiones.

Algoritmos			
dimensión d	Metrópolis	Wolff	Swendsen-Wang
2	2.167(1)	0.25(1)	0.25(1)
3	2.02(2)	0.33(1)	0.54(2)
4	-	0.25(1)	0.86(2)

Tabla 4: Comparación de los valores de los exponentes dinámicos z para los algoritmos de Metrópolis, Wolff y Swendsen-Wang en varias dimensiones. Los valores fueron obtenidos de [27, 39, 40]. Tabla obtenida de [7].

En el presente trabajo se utilizó el algoritmo de Wolff para el caso específico del estudio de tamaño finito para transiciones ferromagnéticas, capítulo 6, mientras que para los análisis restantes se utilizó el algoritmo de Metrópolis.

ALGORITMO DE WOLFF

A modo de completitud y por el hecho de que se utilizó el algoritmo de Wolff, los pasos para crearlo son los siguientes:

- Se selecciona un espín i aleatoriamente.
- Todos sus vecinos j son agregados a una lista con probabilidad $p_{ij} = 1 - \exp(-\beta J(\alpha_{ij} + 1))$ si son paralelos con el espín i . De esta manera se logra un algoritmo en el que no hay rechazos.
- Esto último se realiza también para cada vecino de cada espín j agregado a la lista.
- Una vez que fueron considerados todos los espines de la lista, se invierten.

En la figura 17 se muestra como es el proceso de inversión de espines en el algoritmo de Wolff.

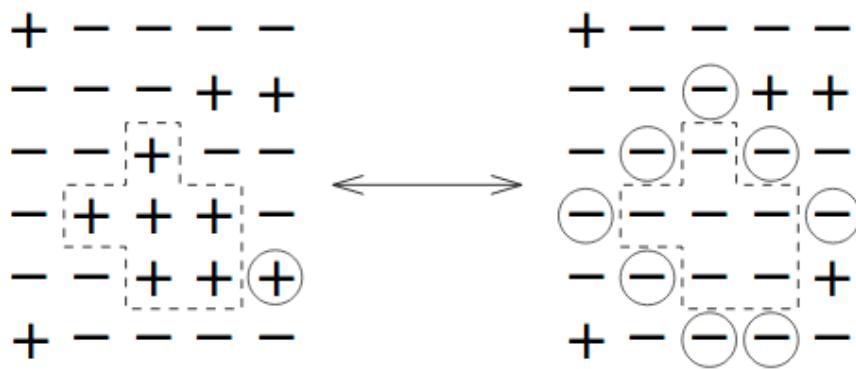


Figura 17: Inversión de los espines en el algoritmo de Wolff. Una lista o cluster de espines está compuesta por un conjunto de espines paralelos. Su límite está indicado por las líneas punteadas, mientras que los espines encerrados no pertenecen a la misma.

6

MÉTODO DE ESCALEO DE TAMAÑO FINITO

Básicamente el método de escaleo de tamaño finito permite extraer de los resultados de las simulaciones a *tamaño finito* ($L \ll \infty$), tanto los valores de los *exponentes críticos* (cuadros 2 y 3) como la *temperatura crítica* válidas en el *límite termodinámico* ($L \rightarrow \infty$), midiendo como varían ciertas cantidades termodinámicas en función del tamaño de la red L del sistema.

Recordar que el comportamiento asintótico de las cantidades termodinámicas se mostró en la tabla 2. Si se considera el caso de la susceptibilidad a modo de ejemplo junto con la longitud de correlación (sección 3.3), en el límite termodinámico:

$$\xi = |t|^{-\nu}, \quad (51a)$$

$$\chi = |t|^{-\gamma}, \quad (51b)$$

donde $t = (T - T_c)/T_c$ es una **variable de escala** que mide la cercanía al punto crítico; siendo $t = 0$ para $T = T_c$ y $t \rightarrow \pm\infty$ para T lejos de T_c . Eliminando el parámetro t y reemplazando nuevamente en la ecuación 51

$$t \sim \xi^{-1/\nu}, \quad (52a)$$

$$\chi \sim (\xi^{-1/\nu})^{-\gamma} = \xi^{\gamma/\nu}. \quad (52b)$$

Dado que a tamaño finito no hay divergencias sino un corte de la función, se puede expresar esto como un *ansatz* de la forma siguiente

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (53)$$

donde χ_0 es una función de escala de la variable unidimensional $x = L/\xi$ que toma los valores

- $\chi_0(x) = \text{constante si } x \gg 1,$
- $\chi_0(x) \sim x^{\gamma/\nu} \text{ si } x \rightarrow 0,$

Para ver la dependencia explícita con la temperatura de la ecuación 53 conviene reescribirla definiendo una cantidad adimensional

$$\tilde{\chi}(x) = x^{-\gamma} \chi_0(x^\nu), \quad (54)$$

entonces,

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu}|t|) \quad (55)$$

Esta ecuación dice como debería variar explícitamente la susceptibilidad con la dimensión de la red en la vecindad del punto crítico. Reescribiendo la misma se obtiene

$$\tilde{\chi}(L^{1/\nu}|t|) = L^{-\gamma/\nu} \chi_L(t). \quad (56)$$

Esta función de escaleo es la misma para todos los tamaños de red. Es por ello que se puede medir χ_L en las cercanías de la temperatura crítica, entonces, $\tilde{\chi}$ debería solaparse para los valores correctos tanto de la temperatura crítica como de los exponentes críticos. De manera similar, se puede hacer esto para la capacidad calorífica, magnetización y cumulante cuarto,

$$c = L^{\alpha/\nu} \tilde{c}(L^{1/\nu}t), \quad (57)$$

$$m = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(L^{1/\nu}t), \quad (58)$$

$$U_4 = \tilde{U}_4(L^{1/\nu}t). \quad (59)$$

ESCALEO DE TAMAÑO FINITO EXTENDIDO

De acuerdo a como se definió la variable de escala previamente $t = (T - T_c)/T_c$, puede notarse que en el caso en el que la temperatura crítica sea nula $T_c = 0$, t no es una variable sensible de escaleo ya que diverge. Una manera de arreglar esto sería incorporar correcciones de escala o encontrar un mejor método para ajustar los datos. [41, 42]

Como primer paso se puede considerar el caso del modelo de Ising en una dimensión que presenta una transición de fase a temperatura nula [41]. El modelo fue resuelto de manera exacta por Ernst Ising [1]. La susceptibilidad y la longitud de correlación vienen dados, en el límite termodinámico por la expresión

$$\xi = \frac{\tanh^{1/2}(\beta)}{1 - \tanh(\beta)} = \tanh^{1/2}(\beta) \tau^{-\nu(=1)}, \quad (60a)$$

$$\chi = \frac{2}{1 - \tanh(\beta)} - 1 = 2\tau^{-\gamma(=1)} - 1, \quad (60b)$$

donde se definió una nueva variable de escala $\tau = 1 - \tanh(\beta)$ acorde de que no diverge a $T_c = 0$. Esta variable de escala toma la forma $\tau(\beta) \sim 2 \exp(-2\beta)$ para $T \ll 1$ y $\tau \rightarrow 1$ para $T \rightarrow \infty$, lo cual es consistente con la regla de Cardy [43] que dice que las variables de escaleo a temperaturas bajas y transiciones a $T = 0$ deben tener un comportamiento particular: en el caso de Ising 1D debe ser proporcional a

$\exp(-2\beta)$, consistente con dicha elección. Eliminando el parámetro β de las ecuaciones 6o se obtiene

$$\frac{\chi + 1}{2 \tanh^{-1/2}(\beta)} = \xi. \quad (61)$$

De esta manera se propone como *ansatz extendido* para tamaño finito como se hizo a principio de este capítulo

$$\frac{\chi + 1}{2 \tanh^{-1/2}(\beta)} = \xi \chi_0(L/\xi). \quad (62)$$

De manera análoga, se introduce una nueva función adimensional que elimine la dependencia de ξ

$$\tilde{\chi}(x) = x^{-\gamma} \chi_0(x^{\gamma(=1)}). \quad (63)$$

De esta manera se obtiene

$$\frac{\chi(\beta) + 1}{2L / \tanh^{1/2}(\beta)} = \tilde{\chi} \left(\frac{L[1 - \tanh \beta]}{\tanh^{1/2}(\beta)} \right), \quad (64)$$

donde se puede utilizar este escaleo para determinar si un dado sistema ordena a temperatura nula, $\beta \rightarrow \infty$. Notar que en el caso bidimensional por ejemplo, se debería reemplazar L por el correspondiente número de espines totales del sistema, L^2 .

7

RESULTADOS

Como se mencionó en la sección 5.1 el modelo estudiado es un sistema del tipo Ising en 2 dimensiones con parámetro de interacción $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ dependiente de la orientación de los espines. el Hamiltoniano correspondiente viene dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j, \quad (65)$$

donde

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} \alpha_{\uparrow\downarrow}, & \text{si } s_i \neq s_j \\ 1, & \text{caso contrario.} \end{cases}$$

Para el caso en que $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ se obtiene el modelo de Ising usual.

Se determinaron las temperaturas críticas del sistema y el tipo de transición de fase para diversos valores de $\alpha_{\uparrow\downarrow}$. Así como también se determinaron los exponentes críticos y se estableció la clase de universalidad a la que pertenece el sistema para cada $\alpha_{\uparrow\downarrow}$, en este caso, la clase de Ising 2D utilizando el método de escaleo de tamaño finito, capítulo 6.

Conociendo las temperaturas críticas en un conjunto de puntos se determinó el diagrama de fase del sistema T_c en función de $\alpha_{\uparrow\downarrow}$.

El caso correspondiente a $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ requirió un análisis por separado ya que presentaba una complejidad adicional respecto a los casos restantes, debido a que se sospechaba que poseía un punto crítico a temperatura nula, caso similar a lo que sucede con el modelo de Ising en una dimensión. Es por ello que primero se estudió la dinámica a tiempos cortos, haciendo un paralelismo al modelo de Ising en una dimensión sin obtener resultados satisfactorios.

Debido a esto, se estudió el mismo sistema agregando un pequeño campo magnético externo para estudiar nuevamente el comportamiento crítico cuando el campo es suficientemente chico. Pero se llegó a un resultado convincente al comparar estos resultados con un desarrollo analítico exacto teniendo en cuenta que en el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ el Hamiltoniano es, a diferencia de una constante, similar al de un material paramagnético, pudiendo afirmar que el sistema no ordena a $T_c = 0$.

El lenguaje de programación utilizado para la simulación del modelo fue Fortran [44], mientras que los gráficos utilizados en los resultados fueron realizados en GNUPLOT [45], R [46], Python [47] y Mathematica [48] según la conveniencia y utilidad.

DETERMINACIÓN DE LA TEMPERATURA CRÍTICA DEL SISTEMA

Tomando como ejemplo el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ se mostrará como determinar la temperatura crítica. Para ello primero se grafica la susceptibilidad en función de la temperatura teniendo en cuenta que el valor máximo de susceptibilidad, a medida que el tamaño de la red aumenta, tiende a desplazarse al valor de la temperatura crítica, como muestra la figura 18.

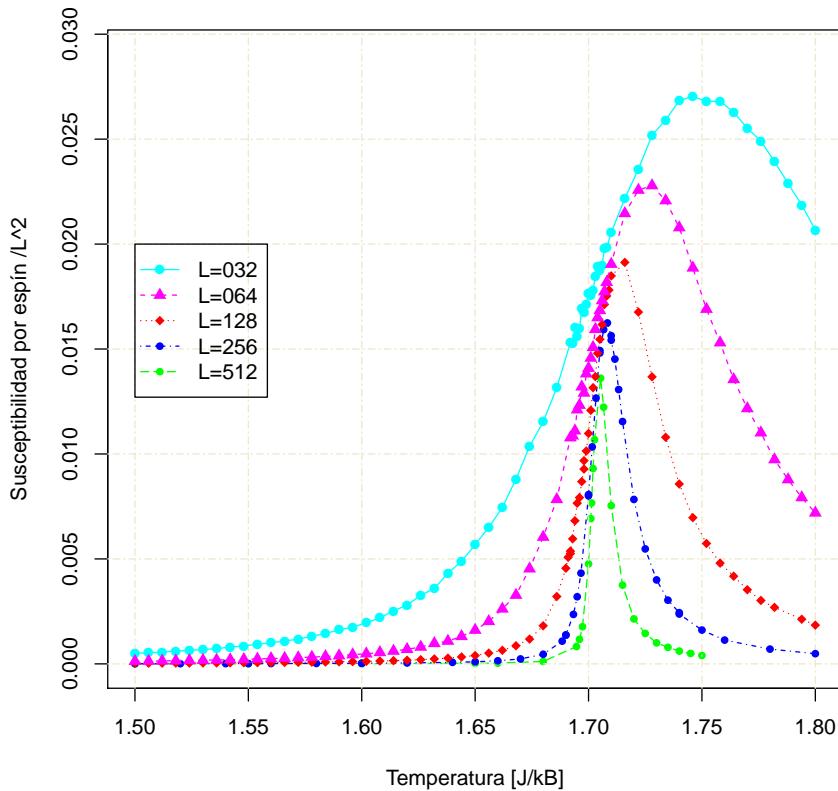


Figura 18: Susceptibilidad en función de la temperatura para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ y tamaños de red $L=32,64,128,256,512$.

Esto permite obtener estimativamente el valor de la temperatura crítica. Pero para conocerla con mayor precisión, se pueden utilizar las propiedades del **cumulante cuarto** U_4 definido previamente en la sección 2.3, como [13]:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}, \quad (66)$$

donde en general $\langle m \rangle$ debe ser el parámetro de orden de la transición. En el caso de ser una transición ferro \leftrightarrow para este parámetro es la magnetización del sistema definida en la ecuación 24. Mientras

que en una transición anti↔ para, como es este caso, habrá que definir una nueva magnetización que sea susceptible al cambio entre las dos fases. Para ello se puede pensar a una red bidimensional como un tablero de ajedrez donde quedarán intercaladamente espines en regiones “negras” y espines en regiones “blancas”.

Para los espines en la región negra se define la magnetización

$$\langle m \rangle_B = \frac{1}{N_B} \sum_{i=1}^{N_B} s_i,$$

donde N_B es el número de lugares negros. De la misma manera para los espines en la región blanca

$$\langle m \rangle_W = \frac{1}{N_W} \sum_{i=1}^{N_W} s_i,$$

donde N_W es el número de lugares blancos. Definiendo así a la magnetización para transiciones anti↔para como

$$\langle m \rangle_A = \frac{1}{2} |\langle m \rangle_B - \langle m \rangle_W|. \quad (67)$$

Esta se comporta de manera esperada, ya que si el sistema se encuentra en un estado antiferromagnético entonces $\langle m \rangle_A \rightarrow 1$, mientras que en la región paramágnetica $\langle m \rangle_A \rightarrow 0$.

Dicho esto las propiedades del cumulante son tales que, en el límite termodinámico $L \rightarrow \infty$, para $T < T_c$ el cumulante tiende al valor $2/3$, para $T > T_c$ el cumulante tiende a cero pasando por un único punto U^* a $T = T_c$ independientemente del tamaño de red. En la figura 19 se muestra el cumulante cuarto en función de la temperatura para varios tamaños de red para los cuales las propiedades del cumulante parecen estar en buen acuerdo con lo estipulado.

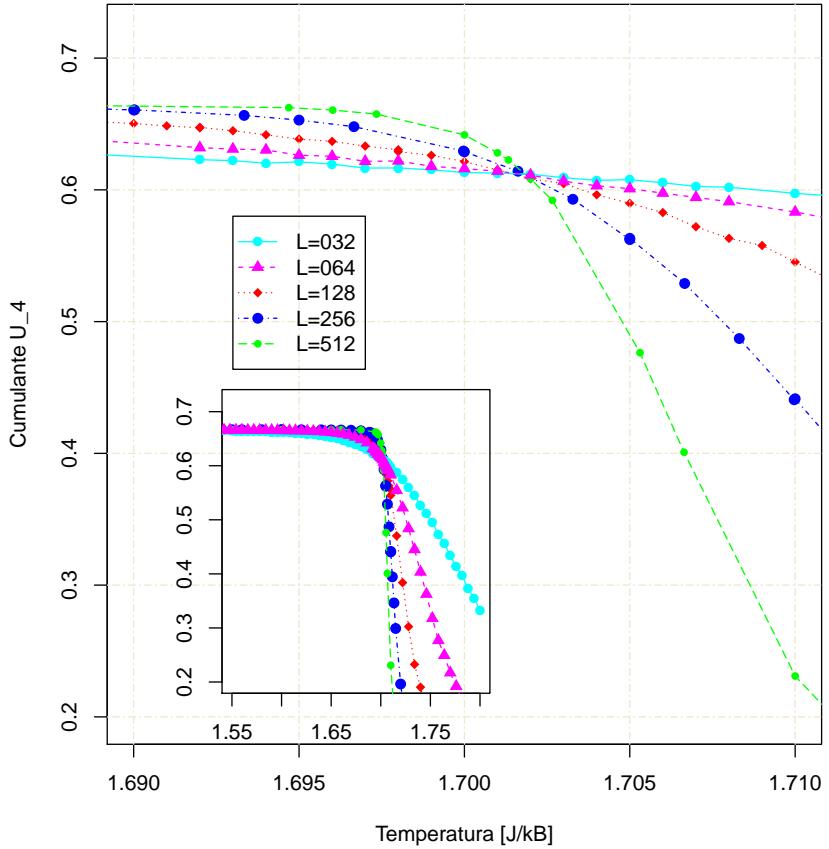


Figura 19: Cumulante U_4 en función de la temperatura para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ y tamaños de red $L=32,64,128,256,512$. Puede notarse que a medida que aumenta el tamaño de la red para $T < T_c$ el cumulante tiende al valor $2/3$. Mientras que a medida que para $T > T_c$ el cumulante tiende a cero. A su vez, las curvas prácticamente pasan por el mismo punto en el punto crítico.

De esta manera, para determinar la temperatura crítica [49], se tomaron pares de curvas $L, L/2$ para distintos tamaños de red (512 y 128, 128 y 64, etcétera), cada una se ajustó con un polinomio de grado 3 para determinar la temperatura a la cual se produce el corte entre ellas, figura 20. La dependencia de la temperatura crítica con la dimensión de la red viene dada por [15]

$$T_c(L) = T_c + AL^{-1/\nu}, \quad (68)$$

donde $T_c(L)$ es la temperatura crítica del sistema en una dimensión de red L , mientras que T_c hace referencia a la temperatura crítica del sistema en el límite termodinámico. A su vez, ν es un exponente crítico estático definido en la tabla 3. Es por ello que para cada punto se graficó la temperatura de cruce en función de $1/L$. Realizando un ajuste lineal de los datos, la ordenada al origen proporcionará el valor de la temperatura crítica del sistema T_c para el valor particular de

$\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ en el límite termodinámico, que en este caso fue de $T_c = 1,701(1)$.

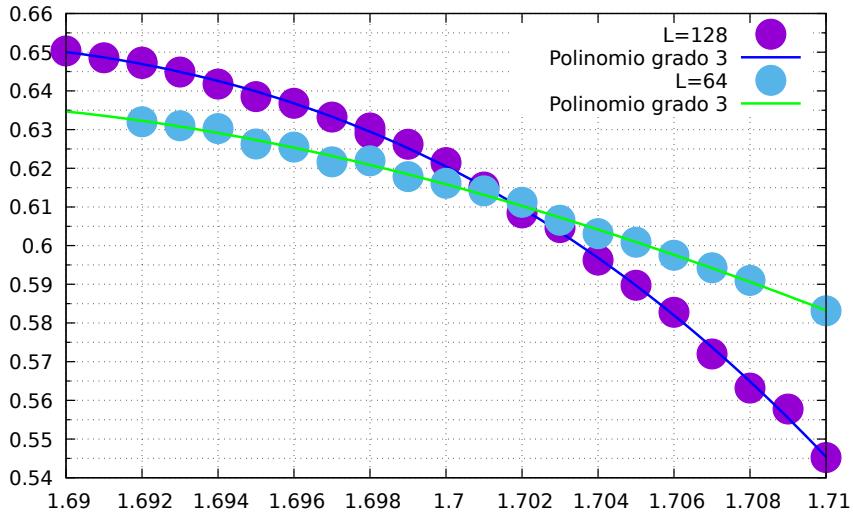


Figura 20: Ajuste polinómico de grado 3 realizado a sobre los datos de la figura 19 para redes de tamaño $L=128$ y $L=64$. El corte entre las curvas determina un valor de temperatura crítica para un dado tamaño finito de red.

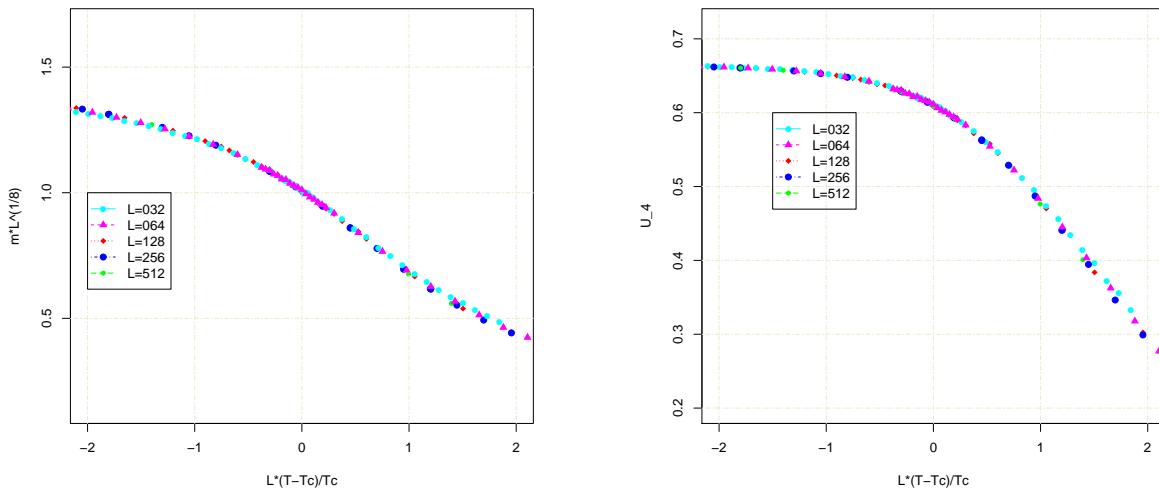
Esto mismo se repitió para todos los puntos para los cuales se quería conocer la temperatura crítica y la transición sea de segundo orden. Esto sucede para todo $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ excepto para el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ que parecería que posee una temperatura crítica nula. Obtener un pico de susceptibilidad como en la figura 18 no fue posible para este valor de $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ no pudiendo el método propuesto ser aplicado y debió ser tratado de manera especial.

DETERMINACIÓN DE LOS EXPONENTES CRÍTICOS Y LA CLASE DE UNIVERSALIDAD

Conociendo el valor de la temperatura crítica se procedió a obtener valores de las variables de interés (Cumulante, Susceptibilidad, Energía, Magnetización) en la proximidad de este valor crítico. En base a lo propuesto por el método de tamaño finito, ecuaciones 6 y 56, al graficar estas curvas para distintos tamaños de red con el valor de la temperatura crítica y los exponentes críticos deberían colapsar en una única curva. En este caso se supuso que el sistema pertenecía a la clase de universalidad de Ising 2D, tabla 3, debido a lo dicho en la sección 3.5.

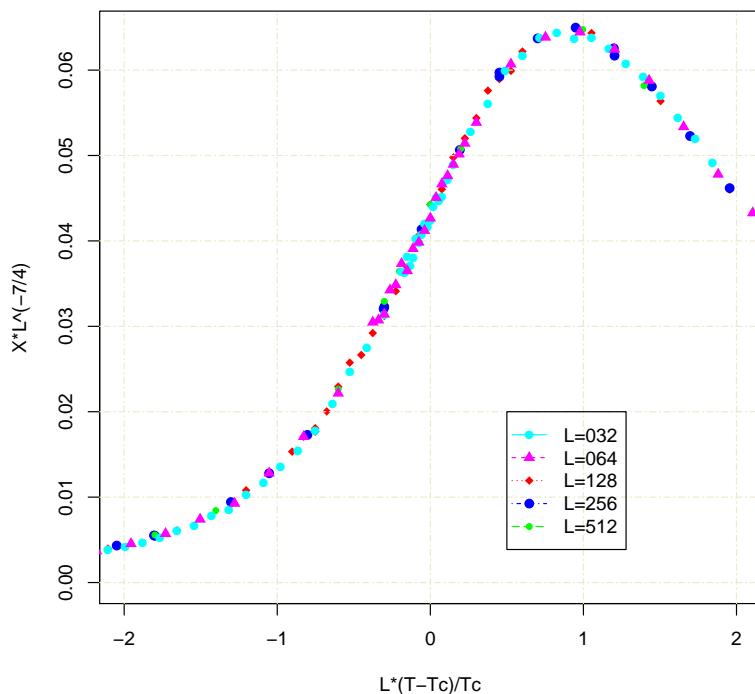
En las figuras 21a, 21b y 21c se muestran el colapso de datos para la magnetización por espín, el cumulante de Binder y la susceptibilidad en función de la temperatura respectivamente para el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$.

El colapso de datos parece ser satisfactorio para los valores de los exponentes críticos de la clase de universalidad del modelo de Ising 2D.



(a) Colapso de datos utilizando la ecuación 6 con la temperatura crítica calculada previamente y los exponentes críticos de la clase de universalidad del modelo de Ising 2D, de la magnetización por espín en función de la temperatura para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ y tamaños de red $L=32,64,128,256,512$.

(b) Colapso de datos utilizando la ecuación 6 con la temperatura crítica calculada previamente y los exponentes críticos de la clase de universalidad del modelo de Ising 2D, del cumulante U_4 en función de la temperatura para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ y tamaños de red $L=32,64,128,256,512$.



(c) Colapso de datos utilizando la ecuación 6 con la temperatura crítica calculada previamente y los exponentes críticos de la clase de universalidad del modelo de Ising 2D, de la susceptibilidad por espín en función de la temperatura para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$ y tamaños de red $L=32,64,128,256,512$.

Figura 21: Colapso de datos de la magnetización por espín, el cumulante de Binder y la susceptibilidad para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0,5$.

DIAGRAMA DE FASES

Conociendo las temperaturas críticas para un conjunto de valores $\alpha_{\uparrow\downarrow}$, se muestra en la figura 22 el diagrama de fases del sistema T_c en función de $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ donde se pueden distinguir tres regiones: una fase ferromagnética, una antiferromagnética y una paramagnética. Cada una de ellas está separada entre si por una transición de fase continua o de segundo orden. A lo largo de estas líneas, para $\alpha_{\uparrow\downarrow} < -1$ hay una coexistencia entre las fases paramagnética y antiferromagnética, mientras que para $\alpha_{\uparrow\downarrow} > -1$ la coexistencia es entre las fases paramagnética y ferromagnética. El punto correspondiente a $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ será analizado luego en mayor profundidad. En la figura 23 se muestran instantáneas del sistema al llegar al equilibrio para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -10, -1,85, -1$ y 1 a una temperatura $T=1.0$.

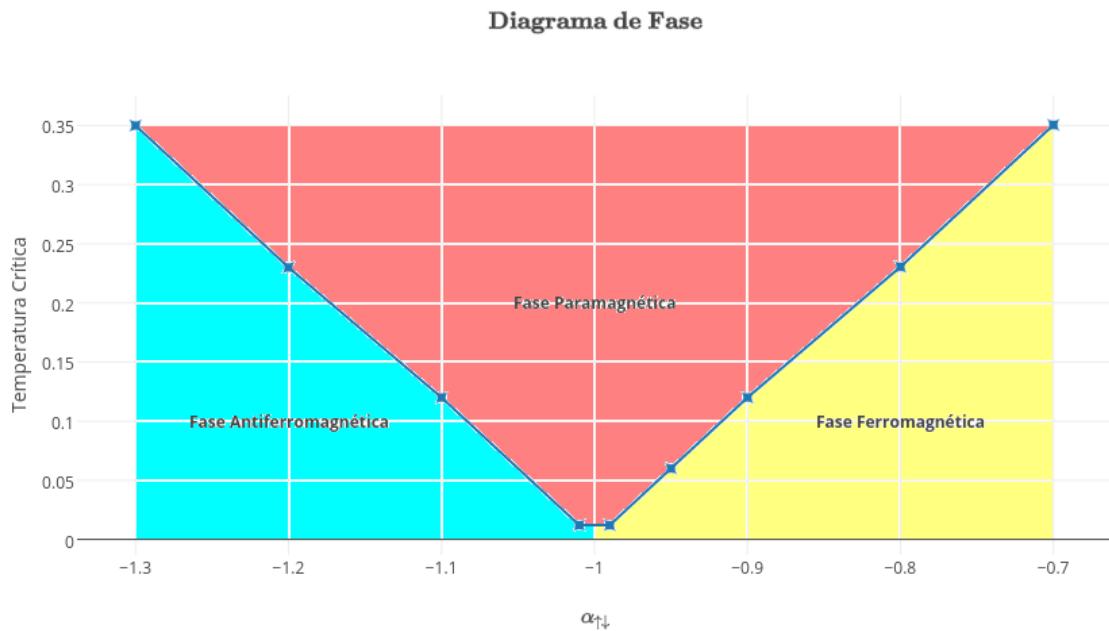


Figura 22: Diagrama de fases del modelo con Hamiltoniano $\mathcal{H} = -\sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j$ [65]. Las transiciones de fase distinguen tres regiones: una región ferromagnética, una paramagnética y una antiferromagnética.

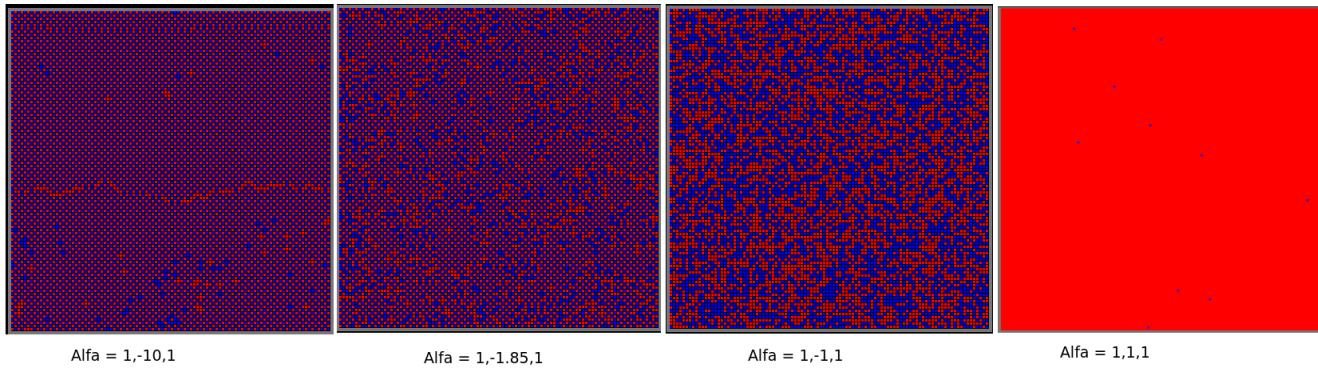


Figura 23: Instantáneas del estado final en equilibrio del sistema para $T=1.0$ y $L=100$ para valores de $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -10, -1,85, -1$ y 1 . Los colores rojo y azul denotan espines $+1$ o -1 . Las primeras dos figuras corresponden a estados con transición antiferromagnética. Para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -10$ el sistema se encuentra en la fase antiferromagnética, mientras que para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1,85$ en la fase paramagnética. La tercera figura corresponde con el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ de un sistema paramagnético. Por último, la figura de la derecha muestra una instantánea de un estado de equilibrio para el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$, el modelo de Ising usual, en la fase ferromagnética. Notar que, como es de esperarse, en esta fase la mayoría de los espines se encuentran alineados en la misma dirección.

CASO: $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$

Para determinar si el sistema ordena a $T_c = 0$ se van a estudiar los métodos siguientes:

1. A partir de la determinación de la susceptibilidad con campo magnético externo aplicado en el límite $H \rightarrow 0$ a temperatura crítica cercana a cero. Se busca determinar si el comportamiento es similar al del modelo de Ising en una dimensión.
2. A partir del estudio de la magnetización en el régimen de la dinámica crítica a tiempos cortos se buscan obtener los exponentes críticos del sistema.
3. Se tratará de obtener un resultado analítico para el modelo en 1D, en 2D y en dimensiones arbitrarias que explique estos resultados.
4. A partir de los resultados con campos magnético $H \rightarrow 0$ ya calculados de las cantidades termodinámicas más importantes se corroborará el resultado analítico.

Implementación con campo magnético

Como se comentó previamente determinar el máximo de susceptibilidad para el modelo con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ sin campo magnético no es posible. Es por ello que se buscaron alternativas a este problema. Una de ellas consiste en añadir un campo magnético externo H , modificándose el Hamiltoniano definido en la ecuación 65 como

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j + H \sum_i s_i. \quad (69)$$

A temperaturas lo suficientemente bajas $T = 0,1,0,2,0,3,\dots$ (idealmente lo más cercanas posibles a la supuesta temperatura crítica) y para campos magnéticos pequeños $H = 0,1,0,2,0,3,\dots$ se puede calcular la magnetización del sistema y, luego, obtener la susceptibilidad a partir de

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H \rightarrow 0}. \quad (70)$$

A una temperatura fija, se obtendrá una curva para $M(H)$ donde se procede a extrapolar el valor correspondiente a $H = 0$ mediante un ajuste a la curva. La susceptibilidad a partir de estos valores extrapolados se puede calcular como

$$\chi = (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (71)$$

Cada una de estas mediciones realizadas a distintos tamaños de red permitiría realizar un análisis de escaleo de tamaño finito, capítulo 6.

En la figura 24 se muestra la magnetización en función del campo magnético externo para distintas temperaturas y un tamaño de red $L=256$.

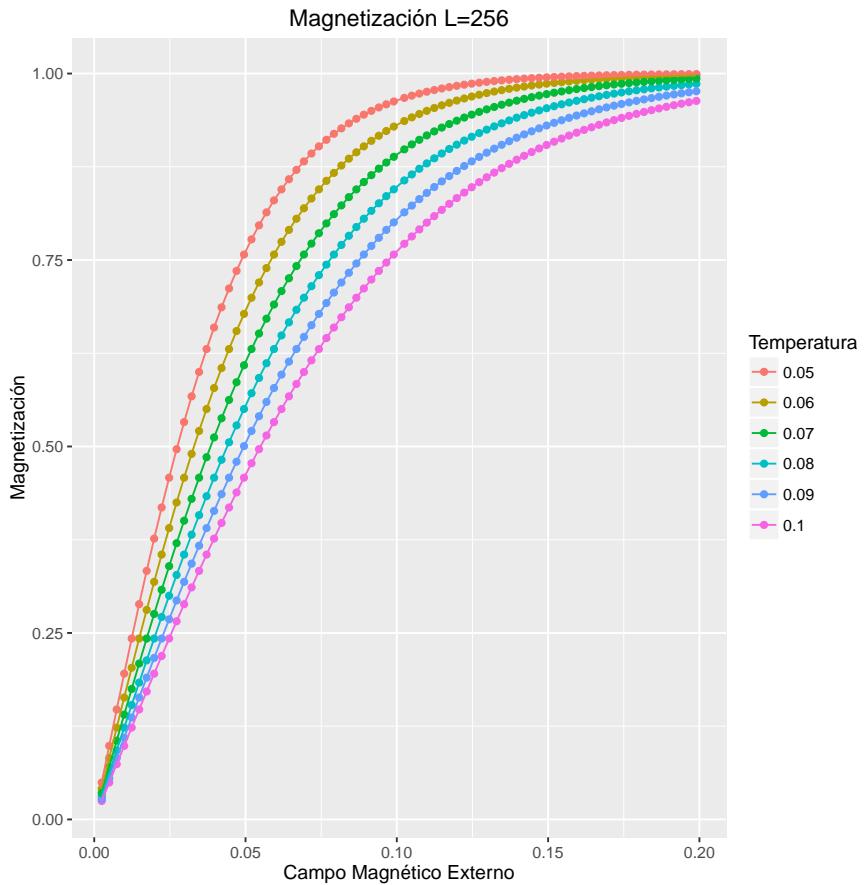
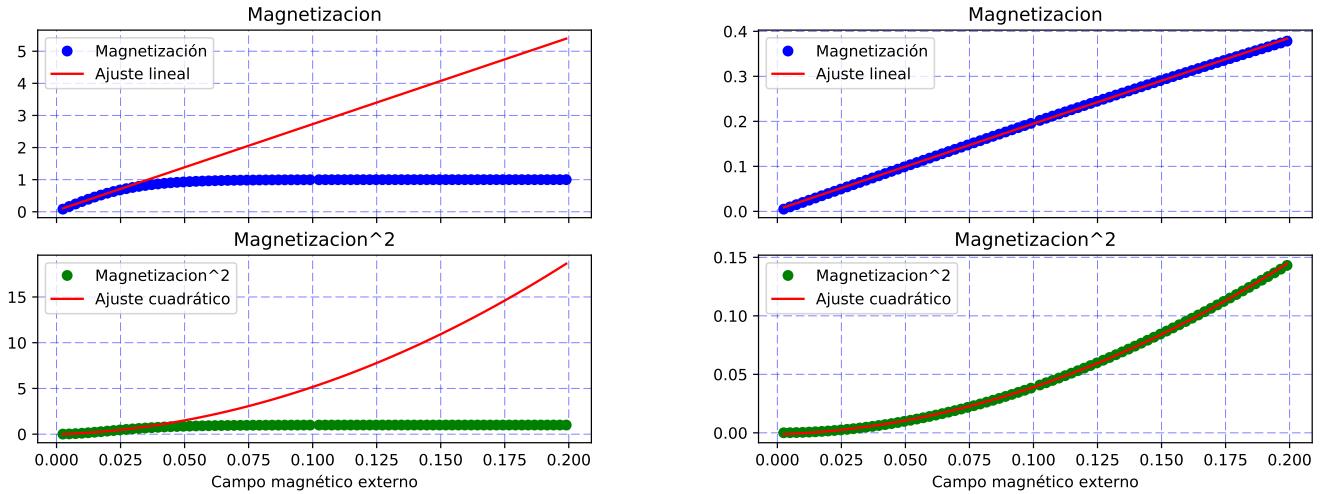


Figura 24: Magnetización en función del campo magnético externo para distintos valores de temperatura y un tamaño de red fija de $L=256$.

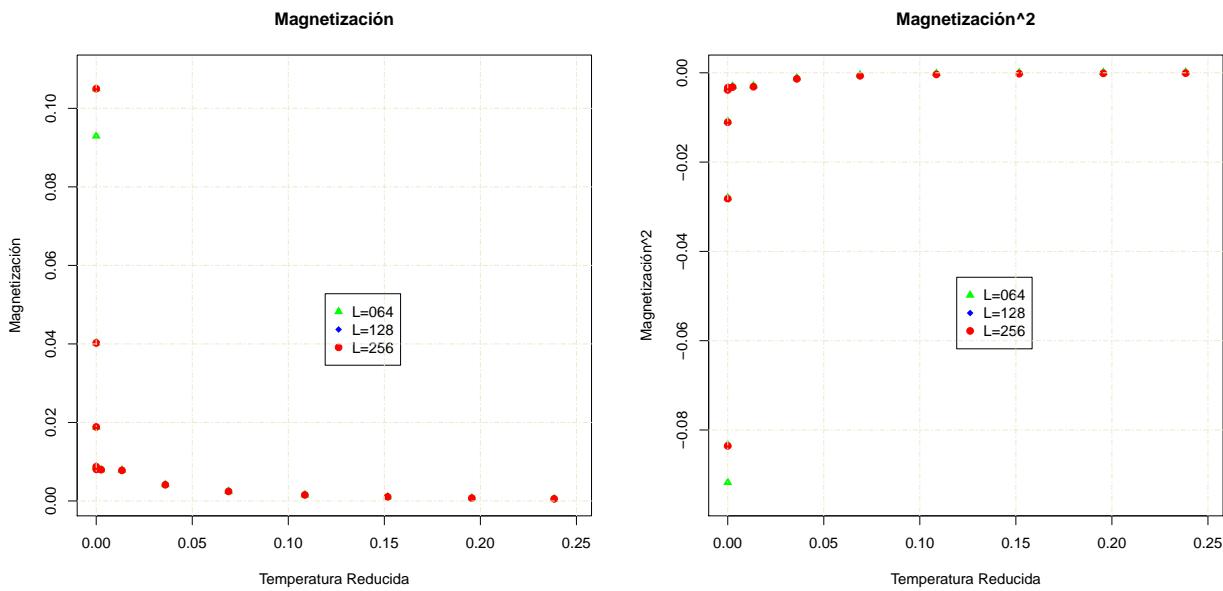
Dado que se quieren obtener los valores de magnetización en el límite $H \rightarrow 0$ se procedió a ajustar cada una de las curvas de la figura 24 para obtener dicho valor extrapolado. Al no poseer conocimiento de una forma funcional de las curvas se procedió a ajustarlas mediante polinomios de primer y segundo orden para la magnetización y la magnetización cuadrada respectivamente. En la figura 25 se muestran los ajustes realizados. Puede notarse que para temperaturas del orden $T \sim 0,5$ este ajuste parece ser el adecuado, pero a temperaturas de un orden de magnitud inferior este ya no es el caso. Esto se evidencia mediante un problema básico en el que la magnetización cuadrada obtenida arroja valores extrapolados negativos, algo que no tiene sentido, figura 26b.



- (a) Magnetización y magnetización cuadrada a temperatura (b) Magnetización y magnetización cuadrada a temperatura
 $T=0.03$ en función del campo magnético externo aplicado. $T=0.5$ en función del campo magnético externo aplicado.

Figura 25: Ajuste a las curvas de Magnetización y magnetización cuadrada en función del campo magnético externo aplicado que permite obtener los valores de las cantidades en el límite $H \rightarrow 0$. Los ajustes polinómicos fueron realizados con la función `numpy.polyfit` de *Python* [47, 50].

En la figura 26 se muestran la magnetización y la magnetización cuadrada en el límite $H \rightarrow 0$ en función de la temperatura reducida $\tau = 1 - \tanh \beta$ definida en la sección 6.1.



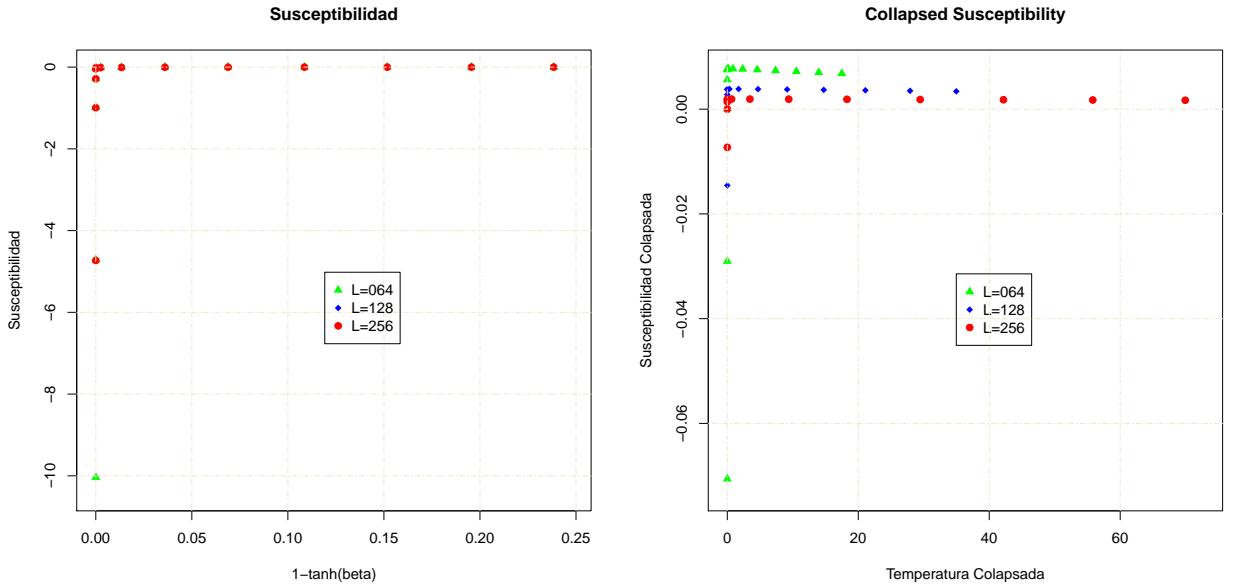
- (a) Magnetización en el límite $H \rightarrow 0$ en función de la temperatura.
- (b) Magnetización cuadrada en el límite $H \rightarrow 0$ en función de la temperatura. A temperaturas reducidas menores que 0.05 lo cual no es posible. Claramente esto es un indicio de que el ajuste realizado no es correcto.

Figura 26: Magnetización y magnetización cuadrada en el límite $H \rightarrow 0$ en función de la temperatura reducida $\tau = 1 - \tanh \beta$.

A partir de los datos de la figura 26 se pudo obtener la susceptibilidad usando la ecuación 71 como lo muestra la figura 27a . Puede notarse que los datos se encuentran solapados, dando una idea de que el estado final del sistema es independiente del tamaño de la red.

Como puede verse en la figura 27 la susceptibilidad para temperaturas reducidas pequeñas es negativa. Arrastrando el problema de la extrapolación de valores a temperaturas pequeñas.

Esto no implica que el sistema no posea una temperatura crítica nula, pero el método propuesto no parece ser el acorde para determinarlo. Para arreglar este inconveniente se podrían, por ejemplo, realizar los ajustes nuevamente con polinomios de mayor orden o tratar de analizar el problema desde otro punto de vista con un método diferente. Es por ello que en la siguiente sección 7.4.2 se realizó un análisis diferente para tratar de establecer si el sistema posee un punto crítico.



(a) Susceptibilidad en función de la temperatura reducida obtenida mediante la ecuación 64 a partir de los datos extrapolados de $\langle M \rangle$ y $\langle M^2 \rangle$ utilizando la ecuación $\chi = (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$. (b) Susceptibilidad colapsada en función de la temperatura reducida, obtenida mediante la ecuación 64 sobre los datos de la figura 27a .

Figura 27: Susceptibilidad y Susceptibilidad colapsada en el límite $H \rightarrow 0$ en función de la temperatura reducida. Claramente obtener un valor negativo de la temperatura indica que hay un error en el método utilizado, el cual es debido al ajuste realizado con polinomios de primer y segundo orden.

Dinámica crítica a tiempos cortos

La **dinámica crítica a tiempos cortos** (STCD, por sus siglas en inglés *Short Time Critical Dynamics*) permite extraer sin necesidad de esperar a que el sistema llegue al equilibrio, los exponentes críticos del sistema. Como su nombre lo indica se estudia la dinámica del sistema a temperatura crítica (o muy cercana a ella) a tiempos cortos $t \ll t_{eq} = L^z$ donde t_{eq} es el tiempo en el que el sistema llega al equilibrio, z es el exponente dinámico del sistema y $z \sim 2$ para Metrópolis [23, 24, 51].

Se sabe que el comportamiento del sistema depende de su configuración inicial. En este caso, m_0 , la magnetización inicial, calculada contando el número de espines positivos o negativos de la red. El *ansatz* propuesto para describir a la magnetización es el siguiente

$$\langle M(t) \rangle \sim b^{-\beta/\nu} F(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, L/b, b^{x_0}m_0), \quad (72)$$

donde $\langle \dots \rangle$ implica promediar con idénticas condiciones iniciales de magnetización m_0 , pero con diferentes configuraciones iniciales y realizaciones de la dinámica; b es un parámetro de reescalamiento; β , ν y z son los exponentes críticos, relacionados con la magnetización, la longitud de correlación ξ , y el tiempo de correlación, respectivamente y

x_0 es un nuevo exponente que describe la dependencia de la magnetización en m_0 durante el régimen a tiempos cortos.

Ahora se considerarán dos situaciones, aquellas donde $m_0 \ll 1$ y aquellas donde $m_0 = 1$. En el primer caso, donde $m_0 \ll 1$, se asume que la longitud de correlación dependiente del tiempo $\xi(t) \sim t^{1/z}$ es pequeña comparada con tanto el tamaño de la red L como la longitud de correlación en equilibrio $\xi_{eq} \sim \tau^{-\nu}$ y redefiniendo $b = t^{1/z}$, la ecuación 72 puede ser reescrita como

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z} F(1, t^{1/\nu z} \tau, L/t^{1/z}, t^{x_0/z} m_0) \quad (73a)$$

$$= t^{-\beta/\nu z} F(t^{x_0/z} m_0) \quad (73b)$$

la cual es esperada que sea válida en el régimen temporal $L/t^{1/z} \gg 1$ y $\xi_{eq}(T)/t^{1/z} \gg 1$. También $F(x)$ debe satisfacer $F(x) \sim x$ para $x \ll 1$ y $F(x) \sim \text{constante}$ para $x \gg 1$. Obteniendo inicialmente un incremento

$$M(t) \sim t^{x_0/z - \beta/\nu z} \sim t^\theta, m_0 t^{x_0 z} \ll 1 \quad (74)$$

el cual define un **exponente crítico dinámico de "incremento inicial"** 0. Para tiempos mayores se observa un decremento crítico de la forma

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}, m_0 t^{x_0/z} \gg 1. \quad (75)$$

Entre estos dos regímenes el sistema presenta un punto de retorno que corresponde a un valor determinado por $m_0 t^{x_0/z} \sim 1$.

Para el segundo caso en el que $m_0 = 1$ se obtiene que el parámetro de orden sigue la misma relación que la de la ecuación 75.

Para corroborar la factibilidad del software desarrollado se procedió a obtener los resultados para el caso de $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$, es decir, el modelo de Ising usual.

En la figura 28 se muestra la magnetización en función del tiempo para una configuración inicial $m_0 = 0,04 \ll 1$, se puede notar en ella el incremento y luego un decrecimiento como era esperado. Por otra parte en la figura 29 se muestran los ajustes correspondientes a gráficos doble logarítmicos de la magnetización en función del tiempo para problemas con condiciones iniciales $m_0 = 1$ y $m_0 = 0,04$. En cada caso el ajuste se realizó sobre la región con forma funcional recta. Los resultados del ajuste se muestran en la tabla 5 los cuales están en buen acuerdo dentro de la incertidumbre con los datos publicados por [24] para el modelo de la dinámica crítica.

	θ	$\beta/\nu z$
Ising 2D [24]	0.187(1)	0.055(69)
Ajuste	0.19(1)	0.057(1)

Tabla 5: Comparación entre los resultados obtenidos por [24] y los obtenidos en el presente trabajo para los exponentes críticos θ y $\beta/\nu z$. Ambos se encuentran en buen acuerdo dentro de la incertidumbre.

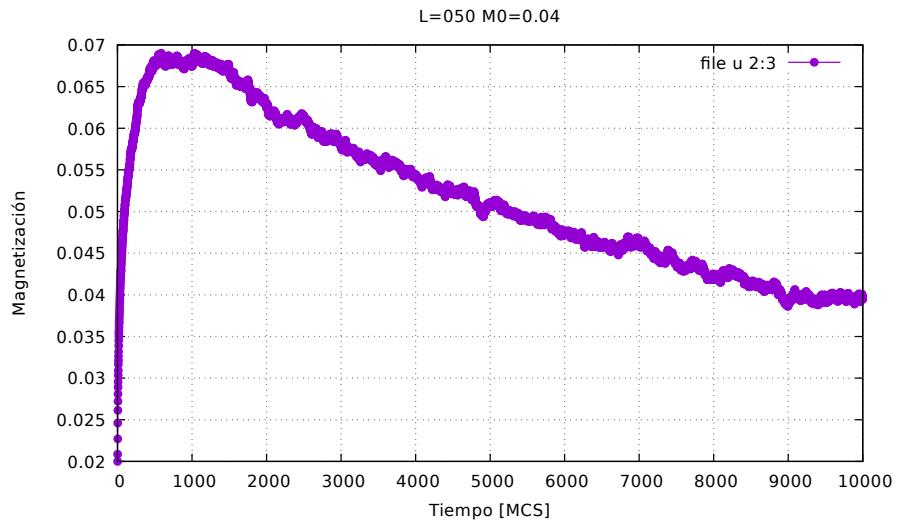
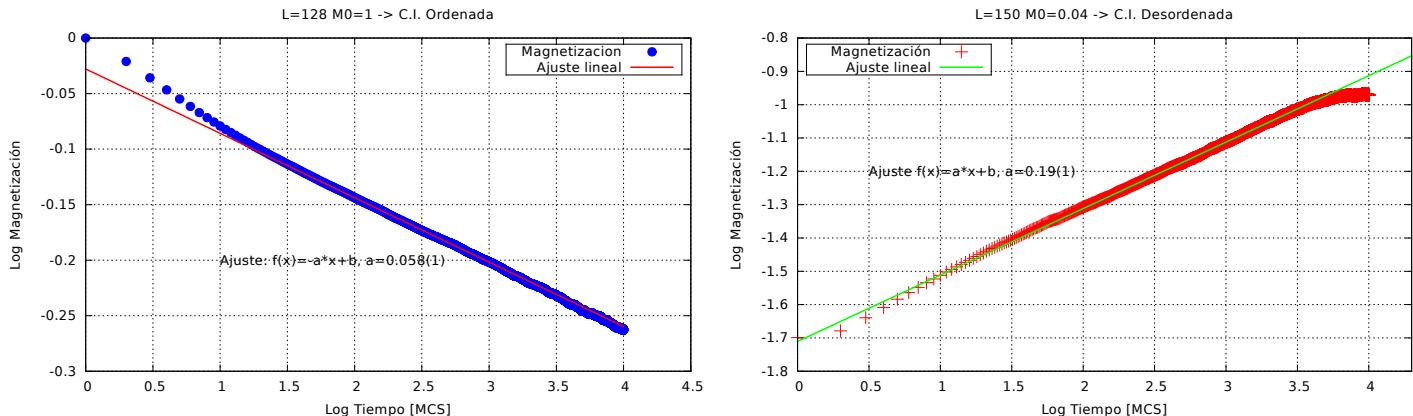


Figura 28: Magnetización en función del tiempo para una configuración inicial de magnetización $m_0 = 0,04$ y un tamaño de red $L=256$.



(a) Gráfico doble logarítmico de la magnetización en función del tiempo con la condición inicial $m_0 = 1,0$. Ajuste sobre la función 74. El resultado del ajuste proporcionó el valor del exponente $\beta/vz = 0,057(1)$.

(b) Gráfico doble logarítmico de la magnetización en función del tiempo con la condición inicial $m_0 = 0,04$. Ajuste sobre la función 75. El resultado del ajuste proporcionó un valor del exponente $\theta = 0,19(1)$.

Figura 29: Corroboration de los resultados correspondientes al modelo de Ising 2D, $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$ para el método de dinámica crítica a tiempos cortos. Los valores del ajuste realizado se muestran en la tabla 5. Los resultados están en buen acuerdo con los mostrados de la bibliografía dentro de la incertidumbre.

Por otra parte los resultados para $\alpha = -1$ se muestran en la figura 30. A partir de estos resultados no pueden aplicarse los métodos explicados anteriormente [23, 24]. El sistema llega al equilibrio a ~ 10 MCS aproximadamente y parece que tanto la condición inicial como el tamaño de la red no afectan la dinámica del sistema.

Esto no implica que la teoría de dinámica crítica a tiempos cortos no sea aplicable a posibles sistemas con puntos críticos a temperatura nula, sino que el mismo no es aplicable a nuestro sistema, pero si a aquellos que lo hacen a una cierta temperatura $T > 0$.

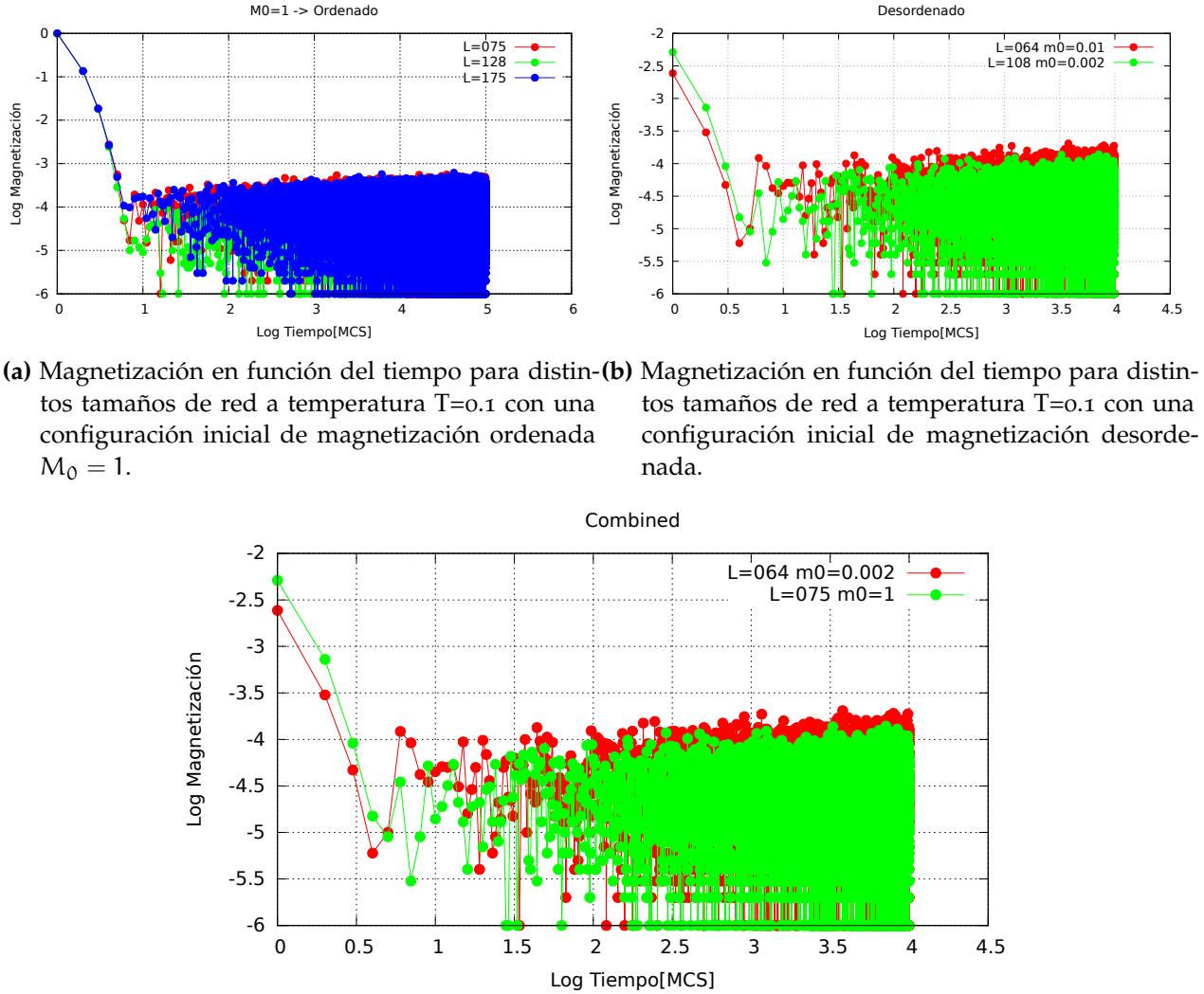


Figura 30: Magnetización en función del tiempo para el modelo con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$. Se puede notar que el comportamiento crítico del sistema es independiente tanto del tamaño de red como de la configuración inicial de los espines M_0 .

Incluyendo un campo magnético pequeño.

A diferencia de las simulaciones hechas para $\alpha = -1$ en la sección [7.4.2](#), ahora se incorpora un campo magnético externo H . Los distintos parámetros utilizados en las simulaciones se muestran en la tabla [6](#).

Dimensión de la red L Magnetización inicial m_0 Temperatura Campo magnético externo H

	Dimensión de la red L	Magnetización inicial m_0	Temperatura	Campo magnético externo H
1	64	1.0	0.1	0.1
2	100	0.02	0.1	0.05
3	100	0.02	0.1	0.1
4	128	0.04	0.1	0.1
5	128	1.0	0.1	0.1
6	256	0.004	0.1	0.1
7	256	0.004	0.05	0.1
8	256	0.02	0.1	0.1
9	256	1.0	0.1	0.1
10	512	1.0	0.1	0.1

Tabla 6: Parámetros de las simulaciones hechas en distintas corridas para dinámica crítica a tiempos cortos para $\alpha = -1$ y un campo magnético externo aplicado H .

Primero se estudió la dependencia con la dimensión de la red L a partir de una configuración inicial de magnetización $m_0 = 1,0$ como muestra la figura [31a](#). Se observa que este parámetro no influye en el comportamiento crítico de la magnetización.

Por otra parte, si se varía la configuración inicial de la magnetización m_0 como muestra la figura [31b](#), para un estado inicialmente ordenado $m_0 = 1$ el sistema disminuye la magnetización hasta un valor en equilibrio a pocos pasos de Monte Carlo (<10MCS). En el caso de que el sistema inicie en un estado inicial de magnetización desordenado $m_0 \ll 1$, el sistema incrementa su magnetización hasta el mismo estado de equilibrio anterior nuevamente en pocos MCS.

En el caso en el que el parámetro a variar sea la temperatura, se observa que el comportamiento tiene la misma forma funcional pero varía el valor en equilibrio alcanzado, ver figura [31c](#).

Por último, variar la magnitud del campo magnético externo presenta una situación similar a lo descrito en el párrafo anterior, ver figura [31d](#).

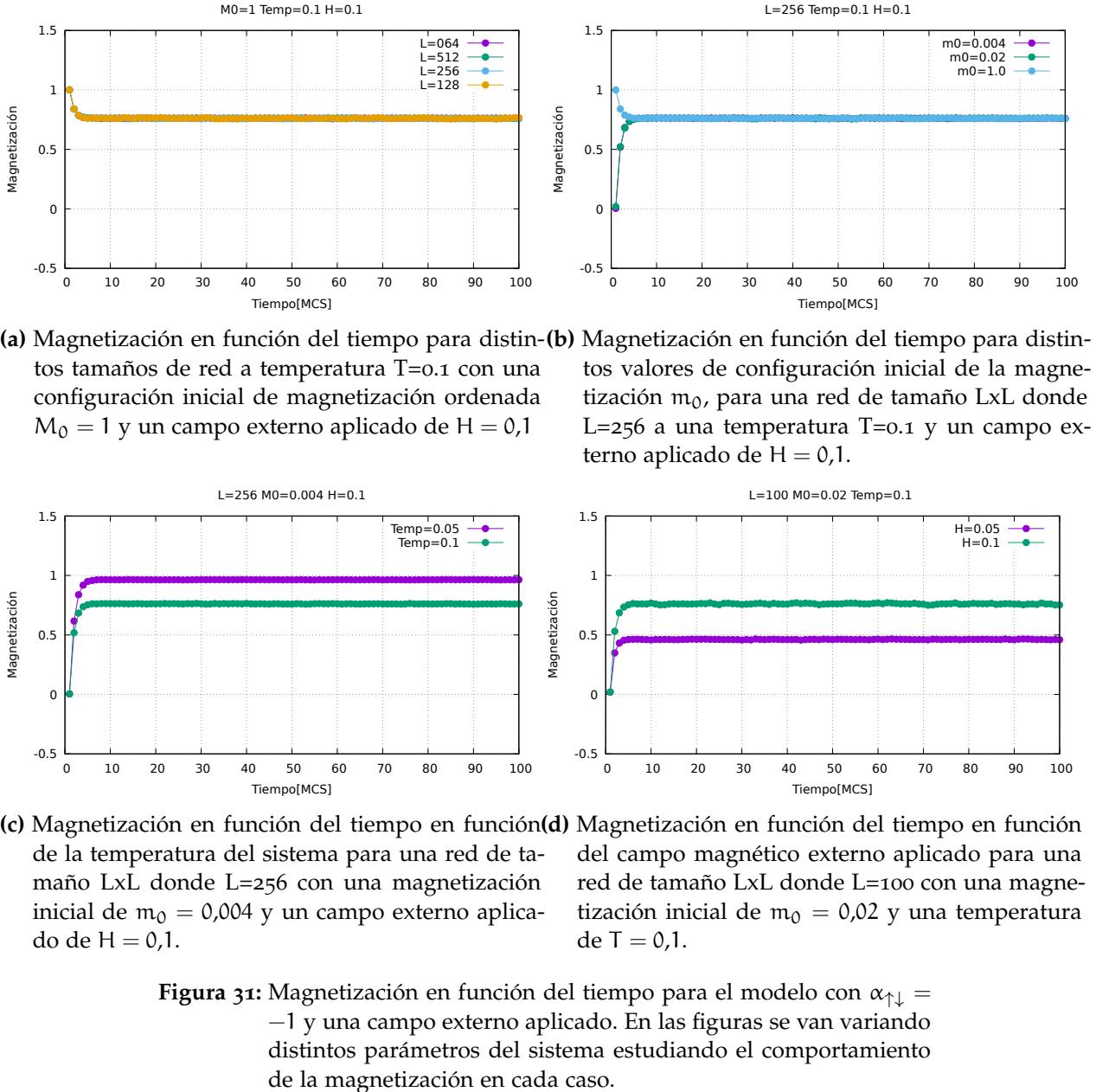


Figura 31: Magnetización en función del tiempo para el modelo con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ y un campo externo aplicado. En las figuras se van variando distintos parámetros del sistema estudiando el comportamiento de la magnetización en cada caso.

Desarrollo analítico del modelo

Luego de realizar el estudio anterior, se intentó entender los resultados obtenidos y notando que el término de interacción del Hamiltoniano 65 $\alpha_{ij}s_i s_j$ es siempre 1 para cualquier enlace de la red que se considere. Como ya se había dicho

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} \alpha_{\uparrow\downarrow} = -1 & , \text{ si } s_i \neq s_j \\ 1 & , \text{ caso contrario} \end{cases}$$

entonces

$$\alpha_{ij}s_i s_j = \begin{cases} (-1) * (-1) = +1 & , \text{ si } s_i \neq s_j \\ (+1) * (+1) = +1 & , \text{ caso contrario.} \end{cases}$$

Esto quiere decir que se puede pensar al caso especial $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ como el correspondiente a un material **paramagnético** sin interacción entre espines.

A continuación se corroborará esto obteniendo las funciones de partición correspondientes al caso uni y bidimensional.

En ambos casos se comenzará calculando la función de partición sin campo magnético externo ($H = 0$)

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j, \quad (76)$$

para después recalcularla con un campo magnético H aplicado

$$\mathcal{H}_N = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i. \quad (77)$$

Luego se compararán los resultados en dos dimensiones, que se cree que ordena a $T=0$, con el desarrollo analítico correspondiente del modelo de Ising en 1D y con los datos de las simulaciones correspondientes.

1D - Una dimensión

El término de interacción se calculará suponiendo condiciones de contorno libres. Esto es posible debido a que en el límite termodinámico las condiciones de contorno no afectan a los valores de las cantidades termodinámicas.

Por consiguiente, el Hamiltoniano 65 viene dado por

$$\mathcal{H}_N^{1D} = - \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_{i,i+1} s_i s_{i+1}, \quad (78)$$

La función de partición es, por lo tanto,

$$Z_N(\beta) = \sum_{\substack{\text{Todas las} \\ \text{configuraciones} \\ \text{posibles del sistema}}} \exp(-\beta \mathcal{H}_N^{1D}) = \sum_{\{s_i=\pm 1\}} \exp\left(\beta \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_{i,i+1} s_i s_{i+1}\right).$$

Utilizando la propiedad de la exponencial $\exp(a + b + c + \dots) = \exp(a) \exp(b) \exp(c) \dots = \prod_i \exp(\tau_i), \tau_1 = a, \tau_2 = b, \dots$

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{s_i=\pm 1\}} \left[\prod_{i=1}^{N-1} \exp(\beta \alpha_{i,i+1} s_i s_{i+1}) \right].$$

Definiendo $\tau_i = \alpha_{i,i+1} s_i s_{i+1}, i = 1, \dots, N-1$

$$Z_N^{1D}(\beta) = \sum_{\substack{\{s_N = \pm 1\} \\ \{\tau_i = +1\}}} \left[\prod_{i=1}^{N-1} \exp(\beta \tau_i) \right] = 2 \prod_{i=1}^{N-1} \left[\sum_{\{\tau_i = +1\}} \exp(\beta \tau_i) \right] = 2 \prod_{i=1}^{N-1} \exp \beta.$$

$$Z_N(\beta) = 2(\exp \beta)^{N-1}. \quad (79)$$

Agregando un campo magnético externo como se indicó en la ecuación 77 la función de partición viene dada por

$$Z_N(\beta, H) = \sum_{\substack{\text{Todas las} \\ \text{configuraciones} \\ \text{posibles del sistema}}} \exp(-\beta \mathcal{H}_N^{1D}) = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \exp \left(\beta \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_{i,i+1} s_i s_{i+1} + \beta H \sum_{i=1}^N s_i \right).$$

Esta ecuación se puede escribir como

$$Z_N(\beta, H) = Z_N^{\text{free}}(\beta) \cdot Z_n^H(\beta, H),$$

donde $Z_N^{\text{free}}(\beta)$ es la función de partición 79 calculada anteriormente sin campo magnético, mientras que en este caso uno se limita a calcular $Z_n^H(\beta, H)$. De esta manera,

$$\begin{aligned} Z_n^H(\beta, H) &= \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \left[\prod_{i=1}^N \exp(\beta H s_i) \right] = \prod_{i=1}^N \left[\sum_{\{s_i = \pm 1\}} \exp(\beta H s_i) \right] \\ &= \prod_{i=1}^N (\exp(\beta H) + \exp(-\beta H)) = (\exp(\beta H) + \exp(-\beta H))^N = (2 \cosh \beta H)^N \end{aligned}$$

Es por ello que la función de partición resulta

$$Z_N^{1D}(\beta, H) = 2(\exp \beta)^{N-1} (2 \cosh \beta H)^N. \quad (80)$$

2D - Dos dimensiones

De acuerdo a la definición de la función de partición y reemplazando el Hamiltoniano sin campo magnético externo 76 se obtiene

$$Z_N(\beta) = \sum_{\substack{\text{Todas las} \\ \text{configuraciones} \\ \text{posibles del sistema}}} \exp(-\beta \mathcal{H}_N^{2D}) = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \exp \left(\beta \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j \right).$$

Utilizando la propiedad de la exponencial $\exp(a + b + c + \dots) = \exp(a) \exp(b) \exp(c) \dots = \prod_i \exp(\tau_i), \tau_1 = a, \tau_2 = b, \dots$

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \left[\prod_{\langle ij \rangle} \exp(\beta \alpha_{ij} s_i s_j) \right].$$

Definiendo $\tau_{ij} = \alpha_{ij} s_i s_j = 1 \forall i, j$, dado que el término entre corchetes no depende de los espines elegidos, se obtiene un factor $(\exp \beta)^N$ (utilizando la notación de [52]) donde $N = qN/2 = 2N$, $q = 4$ y N es el número de enlaces de la red y q es el número de vecinos de un dado espín. En este caso a lo largo del proyecto se trabaja a primeros vecinos.

$$Z_N^{2D}(\beta) = (\exp \beta)^{2N}. \quad (81)$$

Al igual que el caso unidimensional la función de partición bidimensional con campo magnético externo permite factorizarse, entre un término sin campo $Z_N^{\text{free}}(\beta)$ y un término con campo externo $Z_N^H(\beta, H)$. Pero, es exactamente igual al calculado en una dimensión. Entonces,

$$Z_N^{2D}(\beta, H) = (\exp \beta)^{2N} (2 \cosh \beta H)^N = (2 \exp(2\beta) \cosh \beta H)^N. \quad (82)$$

Cantidades termodinámicas

Las cantidades termodinámicas de interés se calculan a continuación únicamente para el caso 2D con campo magnético externo.

La energía libre de Helmholtz

$$F = -kT \log Z_N(\beta, H) = -NkT \log(2 \exp(2\beta) \cosh \beta H)$$

$$F_N(T, H) = -NkT \log 2 - NkT \log(\exp(2/kT) \cosh(H/kT)) \quad (83)$$

La energía promedio por espín

$$E = -\frac{1}{N} \frac{\partial \log Z_N}{\partial \beta} = -\frac{1}{\exp(2\beta) \cosh(\beta H)} (2 \exp(2\beta) \cosh(\beta H) + H \exp(2\beta) \sinh(\beta H))$$

$$E = -(2 + H \tanh(\beta H)) \quad (84)$$

De esta manera la capacidad calorífica por espín

$$C_V = -k\beta^2 \left(\frac{\partial E}{\partial \beta} \right) = k\beta^2 H \frac{\partial}{\partial \beta} (\tanh \beta H)$$

$$C_V = k(\beta H)^2 \operatorname{sech}^2(\beta H) \quad (85)$$

Por otra parte la magnetización total del sistema

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = NkT \frac{\partial}{\partial H} [\log(\exp(2\beta) \cosh(\beta H))] = N \tanh(\beta H)$$

La magnetización por espín

$$m = \frac{M}{N} = \tanh(\beta H) \quad (86)$$

A partir de esto, la susceptibilidad

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H} = \beta \operatorname{sech}^2(\beta H) \quad (87)$$

Por último, la entropía se puede calcular sabiendo que $F = U - TS \implies S = \frac{1}{T}(U - F) = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)$.

$$S = k\beta [-N(d + H \tanh \beta H) + NkT \log (2 \exp(d\beta) \cosh(\beta H))]$$

$$S = Nk [\log (2 \cosh \beta H) - \beta H \tanh \beta H] \quad (88)$$

En la figura 32 se muestra la entropía dada por la ecuación 88 en función de la temperatura para tres valores de campo magnético externo. Puede notarse que a medida que el campo externo es nulo, la entropía tiende a anularse únicamente para $T=0$.

Por otra parte, en la figura 33 se muestra la magnetización dada por la ecuación 86 en función de la temperatura para tres valores de campo magnético externo. A medida que el campo se vuelve cada vez más pequeño, el sistema ordena, es decir, la magnetización se torna máxima e igual a uno únicamente a $T=0$.

Estos resultados están en buen acuerdo con los correspondientes a modelos de materiales paramagnéticos [53-57].

Cabe aclarar que estos resultados se analizan con un campo externo aplicado. El análisis correspondiente a nuestro modelo implica tomar el campo externo nulo previamente y concluir sobre estos datos.

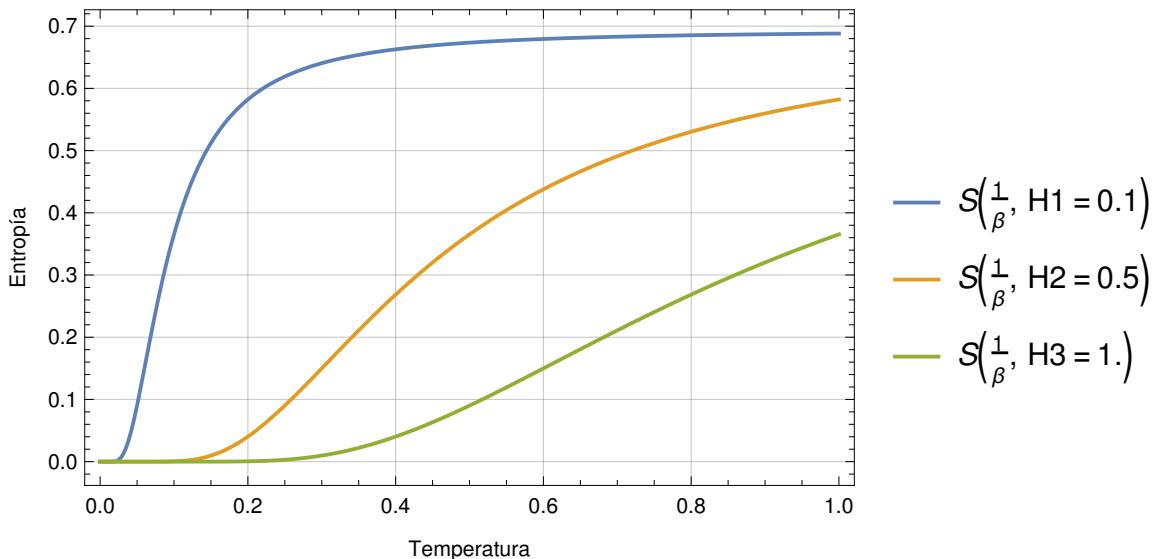


Figura 32: Gráfico de la entropía en función de β para distintos valores de campos magnéticos externos utilizando la ecuación 88.

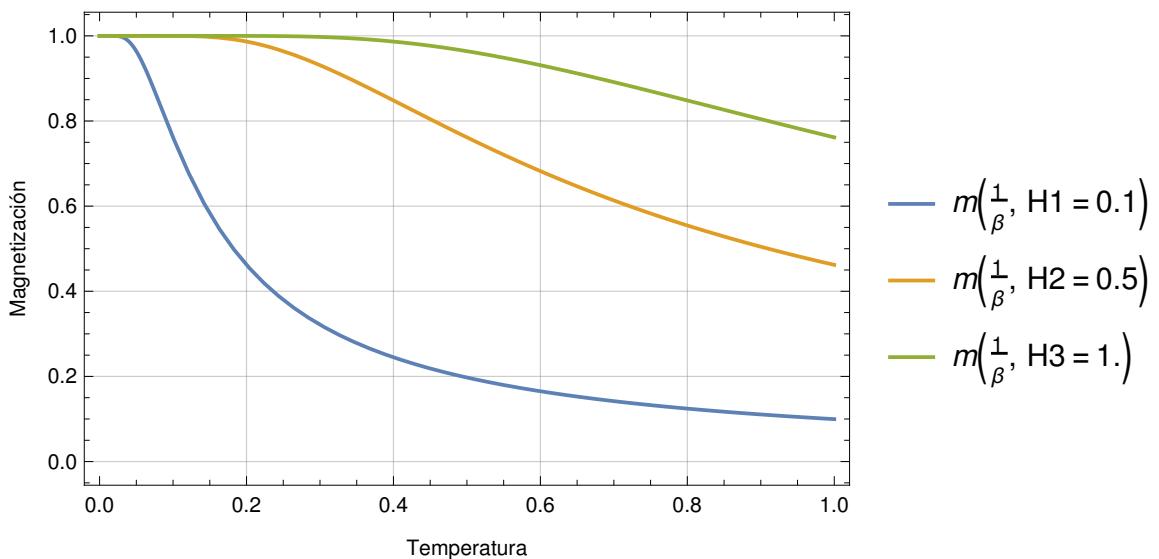


Figura 33: Gráfico de la magnetización por espín en función de la temperatura para distintos valores de campos magnéticos externos utilizando la ecuación 86.

Modelo de Ising en 1D

En esta sección el objetivo será comparar el comportamiento de algunas funciones termodinámicas del modelo de Ising en 1D con las obtenidas en la sección anterior 7.4.3.3, ya que ambas ordenan a T=0.

El Hamiltoniano del modelo de Ising 1D es el siguiente

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i \cdot s_j - H \sum_{i=1}^N s_i, \quad (89)$$

donde J es la constante interacción entre espines que, comparando con nuestro Hamiltoniano, ecuación 41, $J \equiv \alpha_{ij} = 1$.

La función de partición del sistema viene dada por la expresión [11]

$$F(T, H) = -NJ - Nk_B T \log \left[\cosh(\beta H) + \{\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta H)\}^{1/2} \right]. \quad (90)$$

La energía por espín del sistema es

$$E(T, H) = -J - \frac{H \sinh(\beta H)}{\{\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta H)\}^{1/2}} + \frac{2 \exp(-4\beta J)}{[\cosh(\beta H) + \{\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta H)\}^{1/2}][\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta H)]^{1/2}}. \quad (91)$$

Por otra parte la magnetización por espín

$$m(T, H) = \frac{\sinh(\beta H)}{\{\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta H)\}^{1/2}}, \quad (92)$$

que deviene en la ecuación 86 con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ en el caso de eliminar las interacciones entre espines mediante $J = 0$.

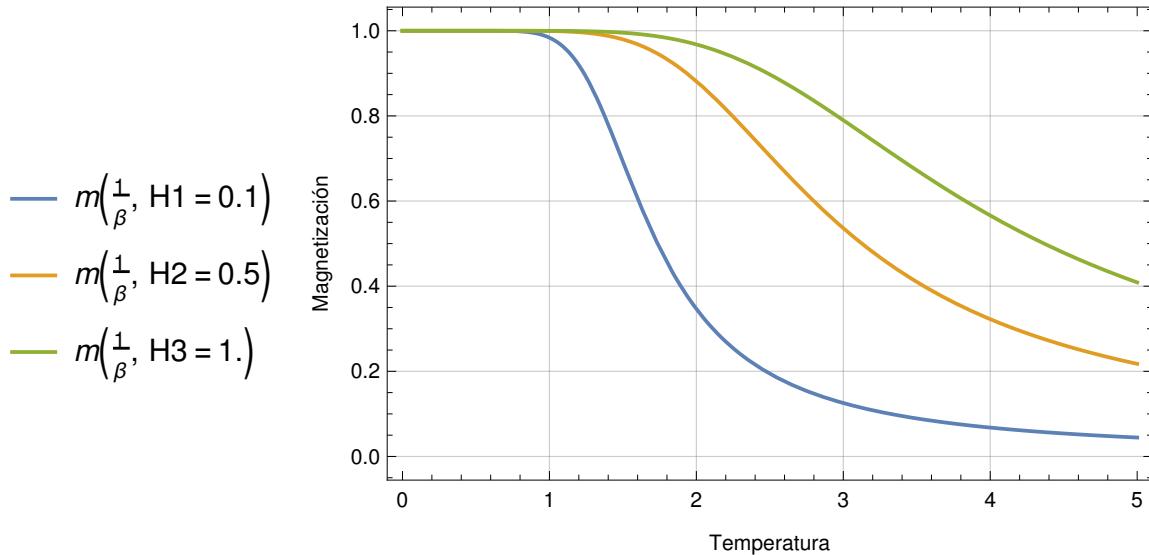


Figura 34: Magnetización en función de la temperatura para distintos valores del campo magnético externo H . La forma funcional de dicha cantidad se muestra en la ecuación 92. Esta coincide con la correspondiente a $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ en 2D para el caso $J=0$, ecuación 86.

EXTENSIÓN A DIMENSIONES ARBITRARIAS Como se dijo al analizar la función de partición en dos dimensiones, ecuación 81, para calcular la función de partición en dimensiones arbitrarias basta analizar $Z_N^d(\beta)$, donde d es la dimensión del sistema, ya que la parte con campo magnético $Z_N^d(\beta, H)$ permanece constante.

Si se considera de ahora en más condiciones de contorno cerradas por simplicidad y, como se dijo anteriormente, esto no influye a las cantidades termodinámica, el término que nos resta calcular es de la forma

$$Z_N^d(\beta) = \prod_{n.n.} \exp \beta = (\exp \beta)^N$$

donde $n.n.$ implica calcular el número total de pares de enlaces a primeros vecinos N (ver imagen 3). Dicho esto, este valor en una dimensión arbitraria es igual a $N = dN$. En consecuencia, la función de partición en una dimensión arbitraria es

$$Z_N^d(\beta, H) = (\exp \beta)^{dN} (2 \cosh \beta H)^N = (2 \exp(d\beta) \cosh \beta H)^N. \quad (93)$$

Resultados con campo magnético externo pequeño $H \rightarrow 0$

En esta sección se muestran los resultados simulados en la sección 7.4.1 para un campo magnético externo pequeño corroborando el comportamiento obtenido del desarrollo analítico realizado en la sección 7.4.3.3.

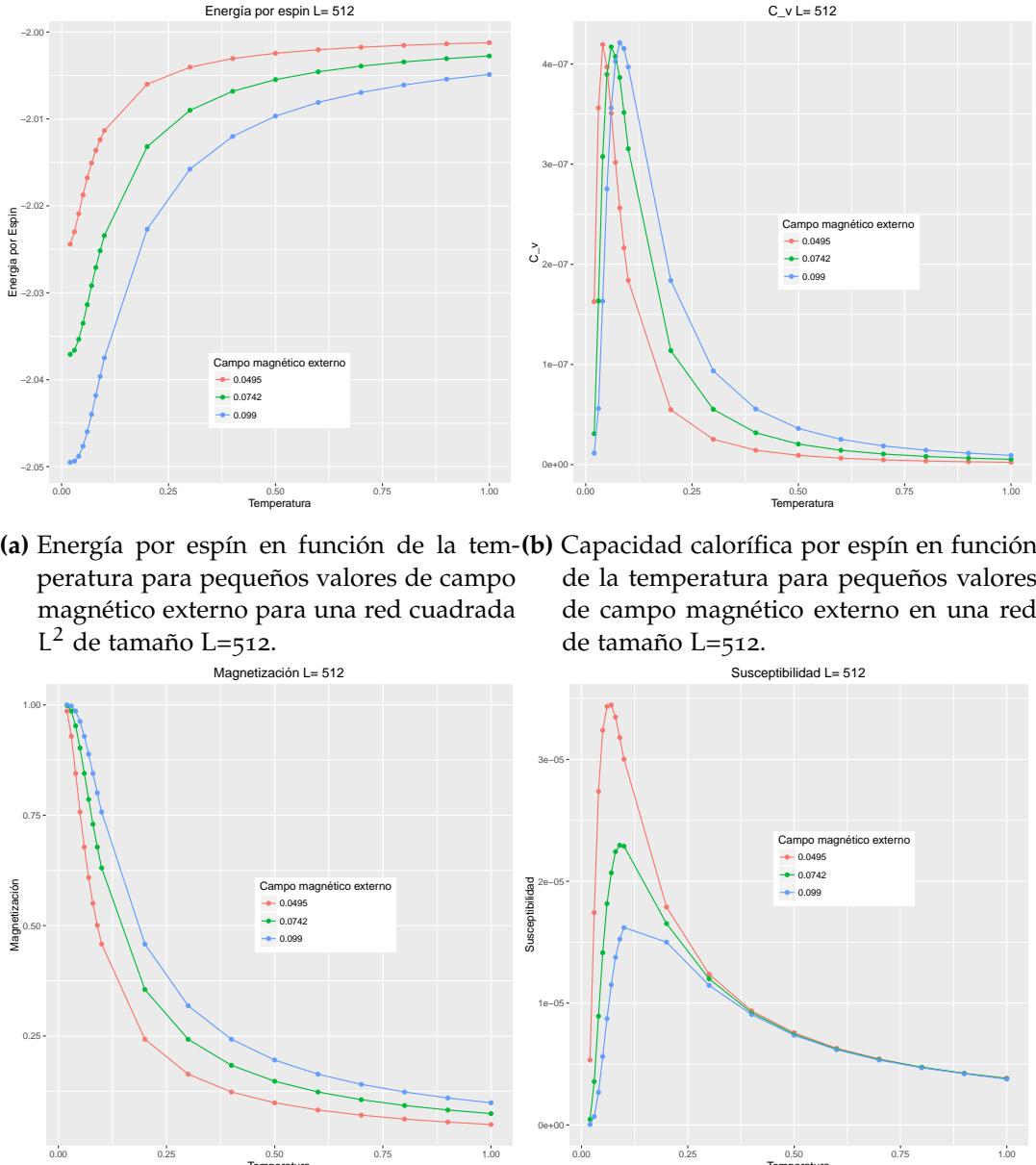


Figura 35: Cantidades termodinámicas más importantes simuladas para el modelo con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ y un campo externo aplicado pequeño $H \rightarrow 0$.

Primero si se considera la energía por espín, ecuación 84; dado que la función hiperbólica $\tanh(x)$ está acotada entre ± 1 , figura 36a, a campos pequeños $H \tanh(\beta H) \rightarrow 0$ es por ello que la energía $E \approx -2$. Esto está en acuerdo con las simulaciones en una red cuadrada de lado con $L=512$ de la figura 35a.

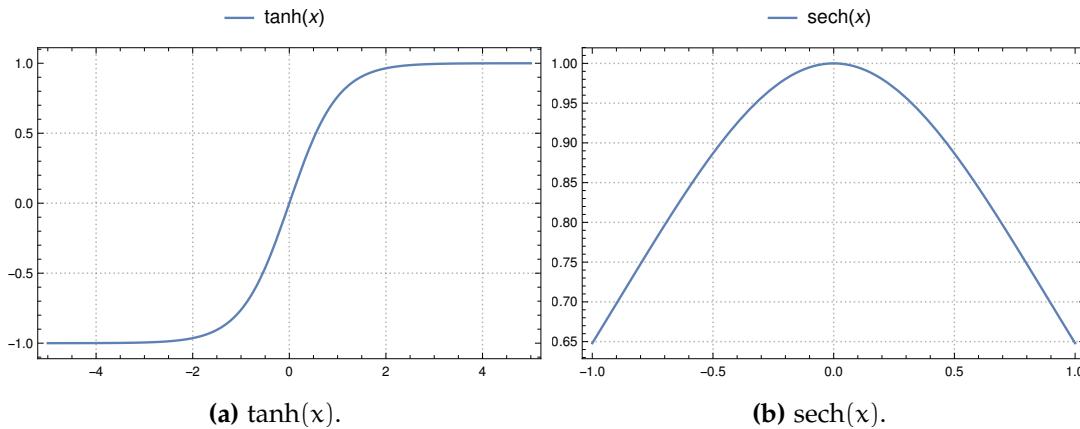


Figura 36: Funciones trigonométricas.

A continuación se considera la capacidad calorífica, ecuación 85 ; la función hiperbólica $\operatorname{sech}(x)$ está acotada entre 0 y 1, figura 36b , por lo que predomina el término βH (ver figura 35b).

A bajas temperaturas los espines tienden a alinearse con el campo magnético externo, por ello que la magnetización por espín $m \rightarrow 1$ (ver figura 35c). Por otra parte la misma se anula a temperaturas altas donde dominan las fluctuaciones térmicas. Estos resultados están en acuerdo con lo obtenido para la entropía. La misma es mínima a temperatura cero y se incrementa cuando la temperatura aumenta.

Por último, la susceptibilidad presenta un comportamiento análogo a la capacidad calorífica. Cabe destacar que el pico máximo que indica la presencia de una transición de fase se va corriendo a $T \rightarrow 0$ a medida que el campo magnético $H \rightarrow 0$.

Luego de lo presentado, se muestra en la figura 37 la concordancia entre los datos simulados de magnetización con un campo externo $H=0.1015$ y la función analítica $m \sim \tanh(H\beta)$, ecuación 86, se puede afirmar que los resultados están en excelente acuerdo entre si.

Pero, en lo que respecta al Hamiltoniano en estudio, sin campo magnético externo, la magnetización por espín, ecuación 86, es nula. Esto tiene sentido ya que al corresponder $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ con un paramágneto, la interacción entre los espines es inexistente, pudiendo afirmar que:

El sistema **no ordena** para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ a temperatura cero.

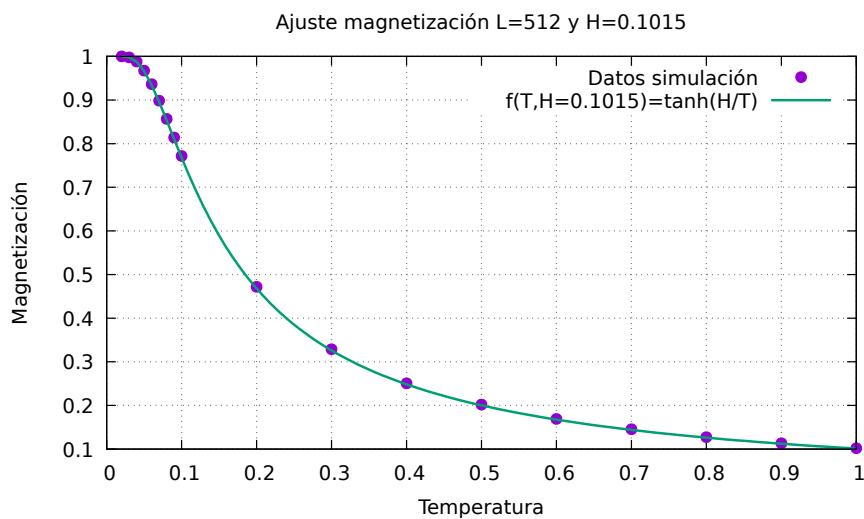


Figura 37: Magnetización para un campo externo $H \sim 0,1015$ con una red de tamaño $L=512$ graficada junto a la función analítica $m \sim \tanh(H\beta)$, ecuación 86. El acuerdo entre los resultados es claro.

8

CONCLUSIÓN

Se estudió un modelo del tipo Ising con un parámetro de interacción dependiente de las orientaciones del espín $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ mediante simulaciones Monte Carlo, el Hamiltoniano del sistema se presentó en la ecuación 65. Se pudo determinar el diagrama de fases T_c en función de $\alpha_{\uparrow\downarrow}$ del sistema, ver figura 5. Se corroboró que el sistema pertenece a la misma clase de universalidad que el modelo de Ising en dos dimensiones y que las transiciones de fase son de segundo orden, excepto para el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$, en el que se encontró que el sistema no ordena para ninguna temperatura por el hecho en que se comporta como un paramagneto.

Por otra parte dado que se pudo resolver analíticamente el sistema para el caso $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$, se intentó tratar de resolverlo para casos de la forma $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1 + \epsilon$ (o, más general $\alpha_{\uparrow\downarrow} = f(\epsilon)$), donde si, por ejemplo, $\epsilon = 2$ uno estaría en el modelo de Ising usual, lo cual podría permitir calcular exponentes críticos para diversos modelos a partir del calculado en el mismo trabajo para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$. Inclusive se podría extender a dimensiones arbitrarias, pero hasta la fecha no se pudo resolver este problema.

Este análisis numérico del modelo se podría extender, por ejemplo, al estudio de interacciones a segundos vecinos, la integración de vacancias en la red o cambios de geometría por nombrar algunas.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Ernst Ising. «Beitrag zur theorie des ferromagnetismus». En: *Zeitschrift für Physik* 31.1 (1925), págs. 253-258.
- [2] Barry M McCoy y Tai Tsun Wu. *The two-dimensional Ising model*. Courier Corporation, 2014.
- [3] Hendrik A Kramers y Gregory H Wannier. «Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I». En: *Physical Review* 60.3 (1941), pág. 252.
- [4] Hendrik A Kramers y Gregory H Wannier. «Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part II». En: *Physical Review* 60.3 (1941), pág. 263.
- [5] Lars Onsager. «Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition». En: *Physical Review* 65.3-4 (1944), pág. 117.
- [6] Frederick Reif. *Física estadística*. Vol. 5. Reverté, 1996.
- [7] GT Barkema y MEJ Newman. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Oxford University Press, 2001.
- [8] J Willard Gibbs. *Elementary principles in statistical mechanics*. Courier Corporation, 2014.
- [9] Julia M Yeomans. *Statistical mechanics of phase transitions*. Clarendon Press, 1992.
- [10] E Richard Cohen. *Quantities, units and symbols in physical chemistry*. Royal Society of Chemistry, 2007.
- [11] Kerson Huang. *Statistical mechanics*. 1963.
- [12] Charles Kittel y Donald F Holcomb. «Introduction to solid state physics». En: *American Journal of Physics* 35.6 (1967), págs. 547-548.
- [13] Kurt Binder. «Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions». En: *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 43.2 (1981), págs. 119-140.
- [14] W Selke. «Critical Binder cumulant of two-dimensional Ising models». En: *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* 51.2 (2006), págs. 223-228.
- [15] David P Landau y Kurt Binder. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press, 2014.
- [16] Alastair D Bruce y RA Cowley. «Structural phase transitions III. Critical dynamics and quasi-elastic scattering». En: *Advances in Physics* 29.1 (1980), págs. 219-321.

- [17] Jens Aage Als-Nielsen. «Neutron scattering and spatial correlation near the critical point». En: *Phase transition and critical phenomena*. Academic Press, Incorporated, 1976.
- [18] John Shipley Rowlinson y Ful Swinton. *Liquids and liquid mixtures: Butterworths monographs in chemistry*. Butterworth-Heinemann, 2013.
- [19] John Wilks, David S Betts y Robert B Hallock. *An introduction to liquid helium*. 1989.
- [20] PM Clintock, DJ Meredith y JK Wigmore. *Matter at Low Temperature*. 1984.
- [21] Pierre-Gilles De Gennes y Richard Alben. *The physics of liquid crystals*. 1975.
- [22] Michael E Fisher. «The theory of equilibrium critical phenomena». En: *Reports on progress in physics* 30.2 (1967), pág. 615.
- [23] EV Albano, MA Bab, G Baglietto, RA Borzi, TS Grigera, ES Loscar, DE Rodriguez, ML Rubio Puzzo y GP Saracco. «Study of phase transitions from short-time non-equilibrium behaviour». En: *Reports on Progress in Physics* 74.2 (2011), pág. 026501.
- [24] B Zheng. «Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics». En: *International Journal of Modern Physics B* 12.14 (1998), págs. 1419-1484.
- [25] A Jaster, J Mainville, L Schülke y B Zheng. «Short-time critical dynamics of the three-dimensional Ising model». En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 32.8 (1999), pág. 1395.
- [26] K Okano, L Schülke, K Yamagishi y B Zheng. «Universality and scaling in short-time critical dynamics». En: *Nuclear Physics B* 485.3 (1997), págs. 727-746.
- [27] MP Nightingale y HWJ Blöte. «Monte Carlo computation of correlation times of independent relaxation modes at criticality». En: *Physical Review B* 62.2 (2000), pág. 1089.
- [28] Fu-Gao Wang y Chin-Kun Hu. «Universality in dynamic critical phenomena». En: *Physical Review E* 56.2 (1997), pág. 2310.
- [29] Michael E Fisher. «The renormalization group in the theory of critical behavior». En: *Reviews of Modern Physics* 46.4 (1974), pág. 597.
- [30] Andrea J Liu y Michael E Fisher. «The three-dimensional Ising model revisited numerically». En: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 156.1 (1989), págs. 35-76.
- [31] E Ao Guggenheim. «The principle of corresponding states». En: *The Journal of Chemical Physics* 13.7 (1945), págs. 253-261.
- [32] Pierre C Hohenberg y Bertrand I Halperin. «Theory of dynamic critical phenomena». En: *Reviews of Modern Physics* 49.3 (1977), pág. 435.

- [33] Nicholas Metropolis, Arianna W Rosenbluth, Marshall N Rosenbluth, Augusta H Teller y Edward Teller. «Equation of state calculations by fast computing machines». En: *The journal of chemical physics* 21.6 (1953), págs. 1087-1092.
- [34] H Müller-Krumbhaar y K Binder. «Dynamic properties of the Monte Carlo method in statistical mechanics». En: *Journal of Statistical Physics* 8.1 (1973), págs. 1-24.
- [35] Bradley Efron. «Computers and the theory of statistics: thinking the unthinkable». En: *SIAM review* 21.4 (1979), págs. 460-480.
- [36] Ulli Wolff. «Collective Monte Carlo updating for spin systems». En: *Physical Review Letters* 62.4 (1989), pág. 361.
- [37] Robert H Swendsen y Jian-Sheng Wang. «Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations». En: *Physical review letters* 58.2 (1987), pág. 86.
- [38] Ferenc Niedermayer. «General cluster updating method for Monte Carlo simulations». En: *Physical review letters* 61.18 (1988), pág. 2026.
- [39] Paul D Coddington y Clive F Baillie. «Empirical relations between static and dynamic exponents for Ising model cluster algorithms». En: *Physical review letters* 68.7 (1992), pág. 962.
- [40] R Matz, DL Hunter y Naeem Jan. «The dynamic critical exponent of the three-dimensional Ising model». En: *Journal of statistical physics* 74.3 (1994), págs. 903-908.
- [41] Helmut G Katzgraber, IA Campbell y AK Hartmann. «Extended scaling for ferromagnetic Ising models with zero-temperature transitions». En: *Physical Review B* 78.18 (2008), pág. 184409.
- [42] K Hukushima, IA Campbell y H Takayama. «Extended Scaling Scheme for Critically Divergent Quantities and Critical Exponents of an Ising Spin Glass». En: *International Journal of Modern Physics C* 20.09 (2009), págs. 1313-1323.
- [43] John Cardy, Jesper Lykke Jacobsen y Alan D Sokal. «Unusual corrections to scaling in the 3-state Potts antiferromagnet on a square lattice». En: *Journal of Statistical Physics* 105.1 (2001), págs. 25-47.
- [44] William H Press, Brian P Flannery, Saul A Teukolsky, William T Vetterling y Peter B Kramer. *Numerical recipes: the art of scientific computing*. 1987.
- [45] Thomas Williams, Colin Kelley y many others. *Gnuplot 4.6: an interactive plotting program*. <http://gnuplot.sourceforge.net/>. 2013.

- [46] R Development Core Team. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. ISBN 3-900051-07-0. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing, 2008. URL: <http://www.R-project.org>.
- [47] Python. *Python 3.5.2*. <https://www.python.org/>. 2016.
- [48] Wolfram Research, Inc. *Mathematica 11.0*. <https://www.wolfram.com>. 2016.
- [49] Michele Dolfi, Jan Gukelberger, Andreas Hehn, J Imriška, K Pakrouski, TF Rønnow, Matthias Troyer, I Zintchenko, F Chirigati, Juliana Freire y col. «A model project for reproducible papers: critical temperature for the Ising model on a square lattice». En: *arXiv preprint arXiv:1401.2000* (2014).
- [50] SciPy.org. <https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.polyfit.html>. 2009.
- [51] HK Janssen, B Schaub y B Schmittmann. «New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation processes». En: *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 73.4 (1989), págs. 539-549.
- [52] Rk Pathria. «Phase Transitions: exact (or almost exact) results for the various models-chapter 12». En: (1972).
- [53] Bernard Dennis Cullity y Chad D Graham. *Introduction to magnetic materials*. John Wiley & Sons, 2011.
- [54] Roger Balian. *From microphysics to macrophysics: methods and applications of statistical physics*. Vol. 1. Springer Science & Business Media, 2007.
- [55] Charles Kittel y Herbert Kroemer. *Thermal physics*. 1998.
- [56] F. Mandl. *Statistical Physics*. Manchester physics series. Wiley, 1971. ISBN: 9780471566588. URL: <https://books.google.com.ar/books?id=jIEpAQAAQAAJ>.
- [57] Roger Bowley, Mariana Sánchez y Robert S Knox. *Introductory statistical mechanics*. Clarendon press Oxford, 1996.