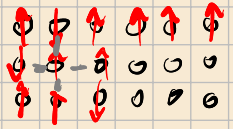


Clase 12/2025

Detalles del Modelo de Ising e Implementación de Monte Carlo

Modelo de Ising

Energía del modelo de Ising:



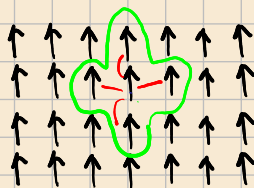
$$H = \underbrace{-J \sum_i \sum_{j \in P.V.} s_i s_j}_{\text{Interacción entre espines}} - \underbrace{\mu B \sum_{i=1}^N s_i}_{\text{Interacción con el campo externo (si lo hubiera)}}$$

- * Localmente, disminuye la energía si se alinean los espines ($\uparrow\uparrow$ ó $\downarrow\downarrow$)
 - \Rightarrow Los estados de espines alineados son favorecidos energéticamente
 - \Rightarrow El sistema presenta transición Ferromagnética. Estados Macroscópicos con magnetización M distintas de cero
- * La temperatura "desordena" el sistema favoreciendo estados con magnetización $M=0$.
- * La "batalla" entre energía y entropía se da así:

$$F = U - TS$$

$T \ll$ \rightarrow Domina minimizar energía

" $F \sim U$ "

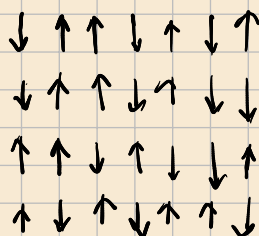


$$M = \sum_i s_i$$

$M > 0 \rightarrow$ Ferromagnético

$T \gg$ \rightarrow Domina Maximizar entropía

" $F \sim -TS$ "



$M = 0 \rightarrow$ Paramagnético

* Espines al azar: up y down ~ equiprobable.

Cambio de energía en un paso de Monte Carlo

$E_\mu \rightarrow E_\nu$ * Tomemos $B=0$ (sin campo magnético externo)

* Cambio sólo un espín: el espín k -ésimo

$$\begin{aligned} E_\nu - E_\mu &= -J \sum_i \sum_{j \in P.V.} S_i^\nu S_j^\nu + \sum_i \sum_{j \in P.V.} S_i^\mu S_j^\mu \\ &= -J \sum_{j \in P.V.} \underline{S_k^\nu} S_j^\nu + J \sum_{j \in P.V.} \underline{S_k^\mu} S_j^\mu \end{aligned}$$

* Sólo hay diferencias en $i=k$

* No cambian los vecinos ($S_j^\mu = S_j^\nu$)

$$\Rightarrow \underline{E_\nu - E_\mu} = -J \sum_{j \in P.V.} S_j^\mu (S_k^\nu - S_k^\mu)$$

$-J (E_\nu - E_\mu)$
 e

Veamos:

$$* \text{ Si } S_k^\mu = +1 \rightarrow S_k^\nu = -1 \Rightarrow S_k^\nu - S_k^\mu = \underline{-2}$$

$$* S_k^\mu = -1 \rightarrow S_k^\nu = +1 \Rightarrow S_k^\nu - S_k^\mu = \underline{+2}$$

$$\Rightarrow \boxed{S_k^\nu - S_k^\mu = -2S_k^\mu}$$

* Ponemos la diferencia de energía en función de la configuración vieja μ

$$\Rightarrow \boxed{E_\nu - E_\mu = 2J S_k^\mu \sum_{j \in P.V.} S_j^\mu}$$

* Este cálculo permite bajar muchísimo el costo computacional del cómputo de la diferencia de energía entre estados nuevos y viejos: sumamos Z términos en lugar de $\frac{1}{2}NZ$ ($Z=4$, para Csqg 2D)

* ΔE queda sólo en función del estado viejo

Pseudo código del algoritmo de Metropolis

Sistema de Ising
MC NVT, canónico
→ T
 $\langle E \rangle, \langle M \rangle, C_p, \chi$

inicializar

loop sobre pasos de MC

(un(i))

- Elegir un spin de la muestra al azar. Plantear $S_k \rightarrow -S_k$

Calcular $(E_b - E_\mu)$

- if $((E_b - E_\mu) < 0)$ then

- Acceptar $\downarrow S_k \rightarrow -S_k$

else ! $E_b > E_\mu$

$r = \text{un}(1)$

- if $(r < A(\mu \rightarrow b))$ then

- Acceptamos $\downarrow : S_k \rightarrow -S_k$

end if

! Si no cumple, no se acepta: queda estado μ . No cambia la muestra

end if



Calcular magnitudes medidas $(\langle M \rangle, \langle M^2 \rangle, \langle E \rangle, \langle E^2 \rangle)$

end loop MC

Medición de Cantidades físicas

* Energía: $\Delta E = E_b - E_\mu$

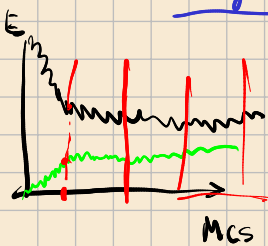
$$E_b = E_\mu + \Delta E$$

* Magnetización:

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

$$\Delta M = M_b - M_\mu = \sum_i s_i^b - \sum_i s_i^\mu = s_k^b - s_k^\mu = 2s_k^b$$

$$M_b = M_\mu + 2s_k^b$$



$E_{med} = 0$

do $i = 1, N$! loop MC

$E_\mu + \Delta E \rightarrow E_\mu$

$E_{med} = E_{med} + E$
write $(20, E)$ i, E

end do

$$E_{med} = E_{med} / N = \frac{E_1 + E_2 + \dots + E_N}{N}$$

Calor específico y susceptibilidad magnética

$$\langle E^2 \rangle = \langle E_{med} \rangle^2 + \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

$$\langle E \rangle = 0$$

Calor específico

$$C_v = \frac{1}{k_B T^2 N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

$$C_v \propto \text{Var}(E)$$

Susceptibilidad magnética

$$\chi = \frac{N}{k_B T} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$$

$$\chi \propto \text{Var}(m)$$

valor medio de $m = \frac{M}{N}$

valor cuadrático medio de m

Do $i=1, N$

$$M_{-2} = M_{-2} + M \times M$$

estado

$$M_{-2} = M^2 / N$$

Funciones de correlación

* ¿Cuánto tiempo (o pasos de MC) le toma al sistema llegar a otro significativamente diferente?

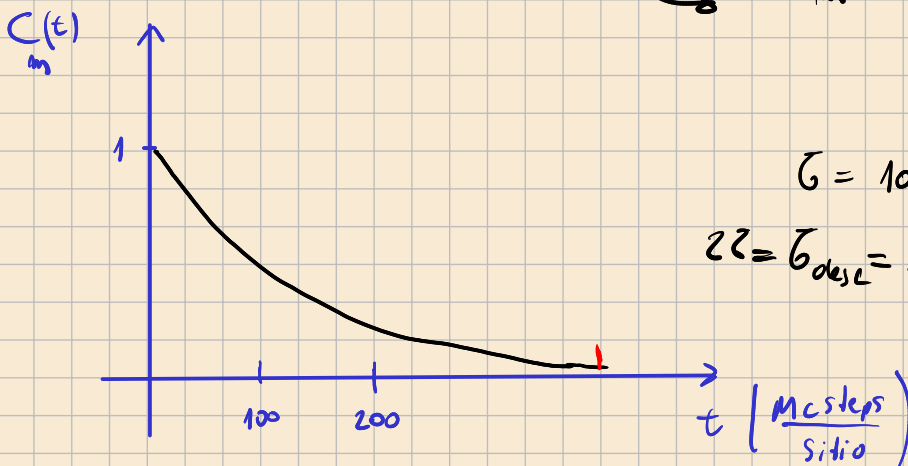
De otro modo: ¿en un estado es el cual el número de espines diferentes es el de 2 configuraciones distintas elegidas al azar?

→ Funciones de autocorrelación (time displaced correlation functions)
Ej: magnetización

$$C_m = \int dt' (m(t') - \langle m \rangle) (m(t+t') - \langle m \rangle)$$

$$= \int_{t'=0} dt' (m(t') \cdot m(t'+t) - \langle m \rangle^2)$$

$$C_m = A e^{-t/\tau}$$



$$\tau = 100$$

$$2\tau = \tau_{desc} = 200$$

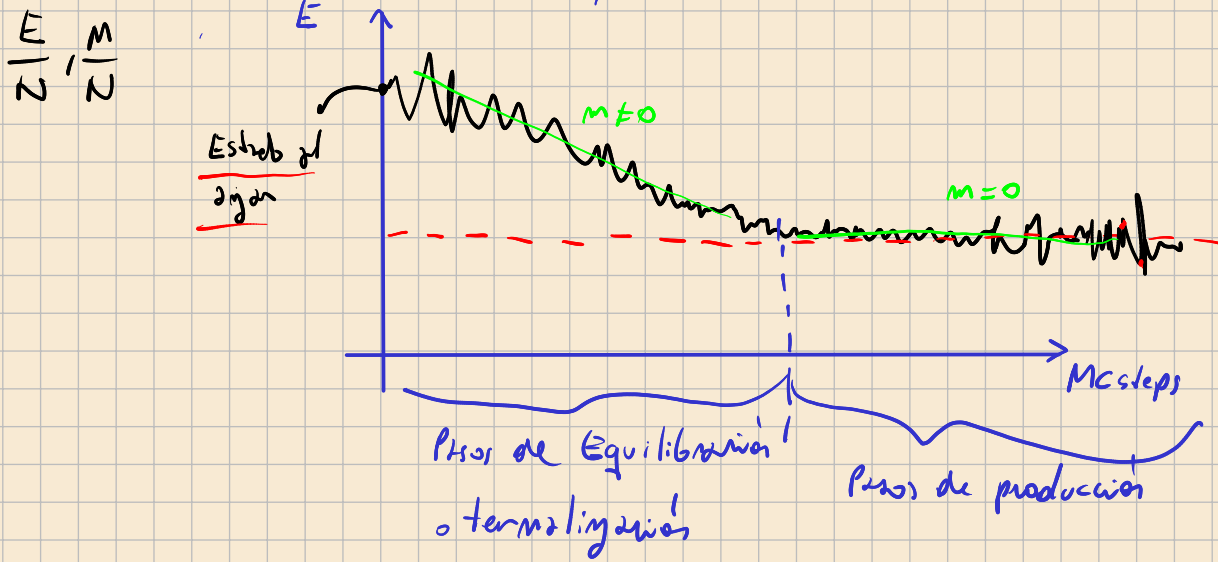
Definimos

tiempo de correlación τ : cuando C cae a e^{-1}

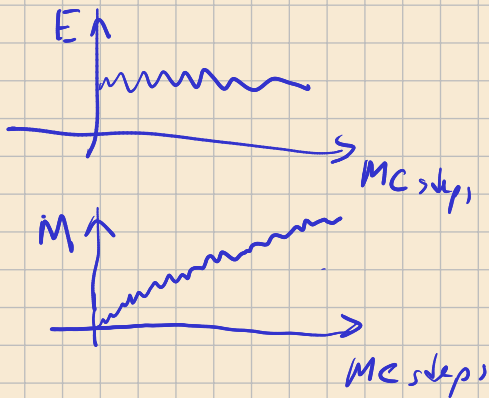
tiempo de descorrelación: $\tau_{desc} = 2\tau$

Equilibración

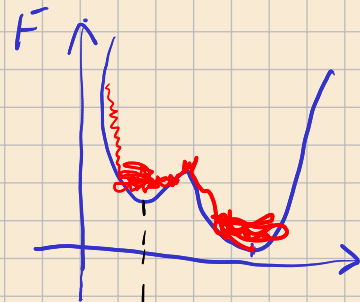
Equilibrio \rightarrow probabilidad media de encontrar el sistema en el estado $n \propto e^{-\beta E_n}$



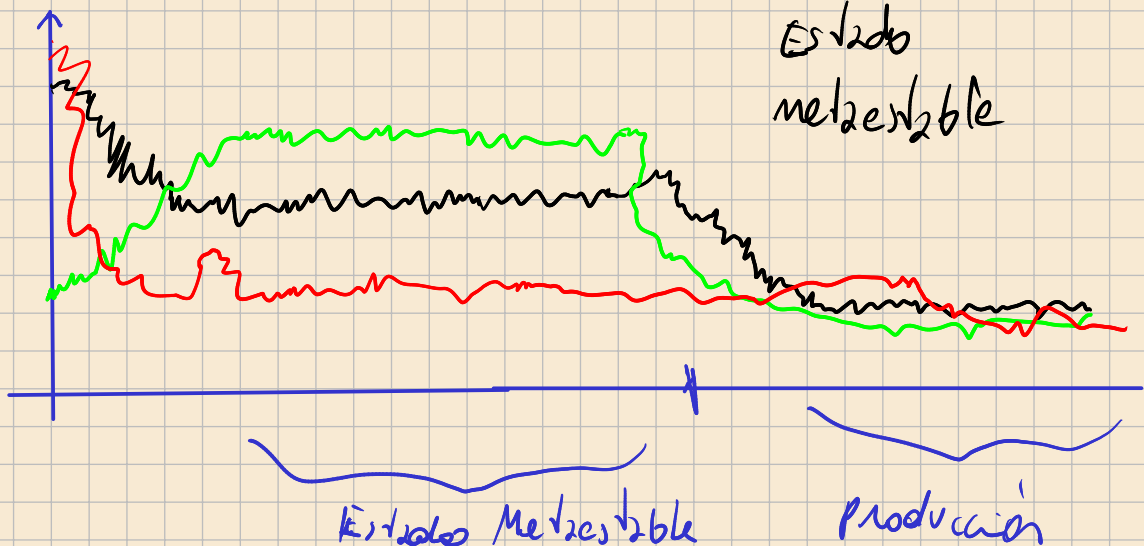
Supongamos esto



No está equilibrado!



Ej: Estados metaestables





E, M E, M E, M E, M
 ~~$\langle E \rangle, \langle M \rangle$~~ $\langle E \rangle, \langle M \rangle$ $\langle E \rangle, \langle M \rangle$ $\langle E \rangle, \langle M \rangle$

$$\langle E \rangle = \frac{\langle E_2 \rangle + \langle E_3 \rangle + \langle E_4 \rangle}{3}$$

Programa MC

definir $m(30, 30)$, K_B , T ↗️ escalar

E_n, E_0 escalares?

* Código que pinta un microestado → llenar la matriz con 1 o -1 sorteando al azar.
 $u_i() \rightarrow 0, 1$

$$m(i, j) = -1$$

* Escalar o parámetro. o a derecha
 esa primera matriz

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$