



MODELO DE ISING

PABLO TEJERO GARCÍA



31 DE MAYO DE 2023
COMPUTACIÓN AVANZADA
PRÁCTICA IV - FINAL

- **Introducción y objetivos:**

El modelo de Ising, propuesto por el físico Wilhelm Lenz y popularizado por Ernst Ising en la década de 1920, es un modelo teórico que describe la interacción entre espines en un sistema magnético. En el modelo de Ising, se considera un conjunto de espines que pueden estar en dos posibles estados: arriba (+1) o abajo (-1). Estos espines están dispuestos en una red y están sujetos a interacciones entre sí. La interacción entre espines principal ocurrida en este modelo es establecida mediante un término de energía que depende de la alineación de los espines vecinos. Si dos espines vecinos están alineados (ambos hacia arriba o ambos hacia abajo), la energía es menor que si están desalineados.

Este modelo ha sido ampliamente utilizado para estudiar las transiciones de fase en sistemas magnéticos. Una transición de fase es un fenómeno en el cual las propiedades macroscópicas de un sistema cambian drásticamente al cruzar una determinada temperatura crítica. En el caso del modelo de Ising, las transiciones de fase pueden ser de primer o segundo orden, dependiendo de las condiciones del sistema.

Este algoritmo tiene como objetivo analizar y comparar entre sí las transiciones de fase de primer y segundo orden en el modelo de Ising.

- **Procedimiento:**

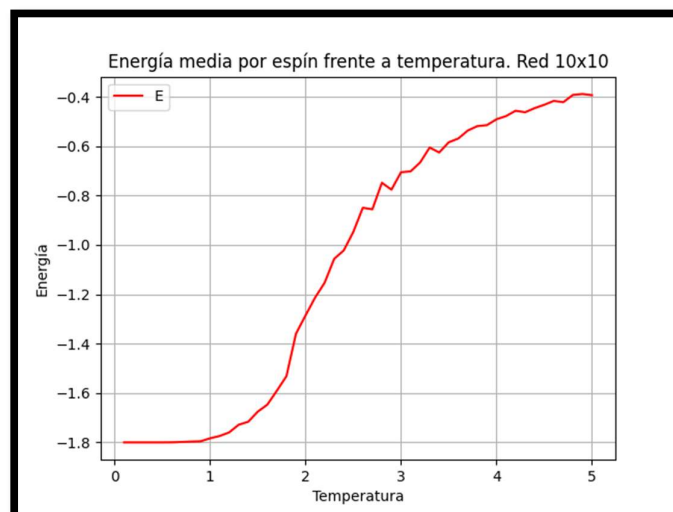
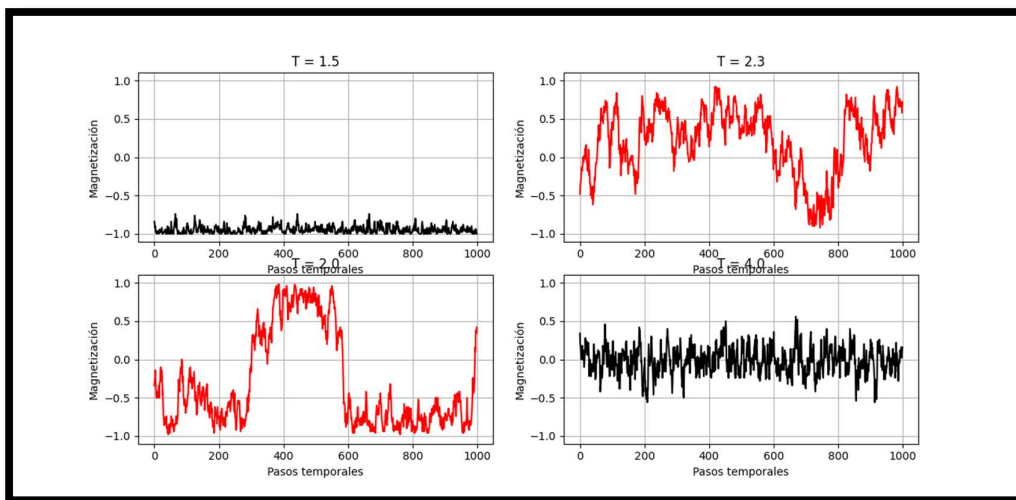
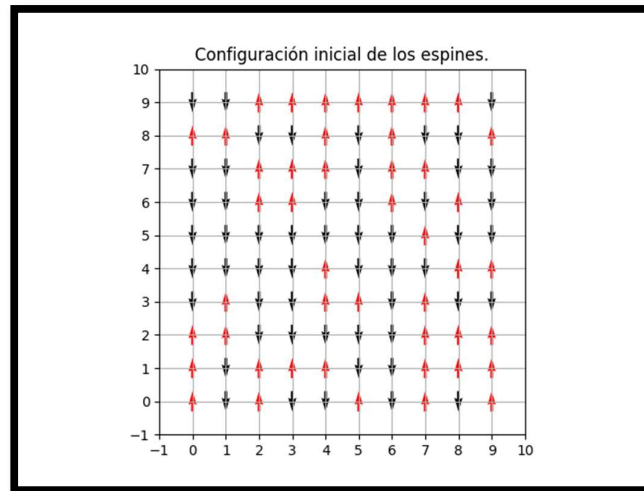
En esta práctica se ha estudiado el modelo de Ising para un sistema ferromagnético de dos dimensiones, por lo que la red de espines es cuadrada, empleando el algoritmo de Metropolis. Dicho algoritmo, desarrollado en la década de 1950 por el físico Nicholas Metropolis, se basa en la realización de simulaciones Monte Carlo del sistema a analizar a diferentes condiciones. En este caso, las condiciones iniciales que varían son temperatura y disposición de los espines. El algoritmo permite explorar el espacio de configuraciones del sistema y obtener muestras representativas del sistema en equilibrio térmico.

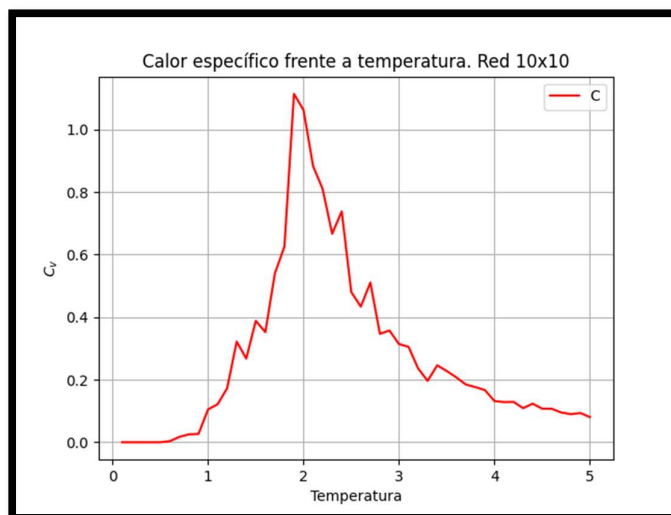
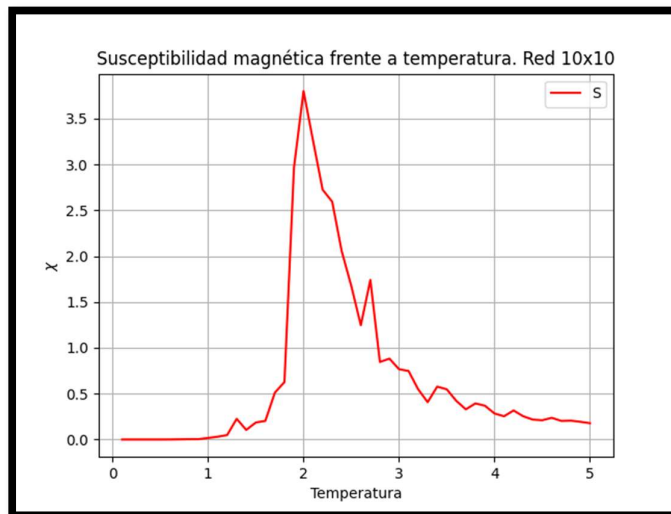
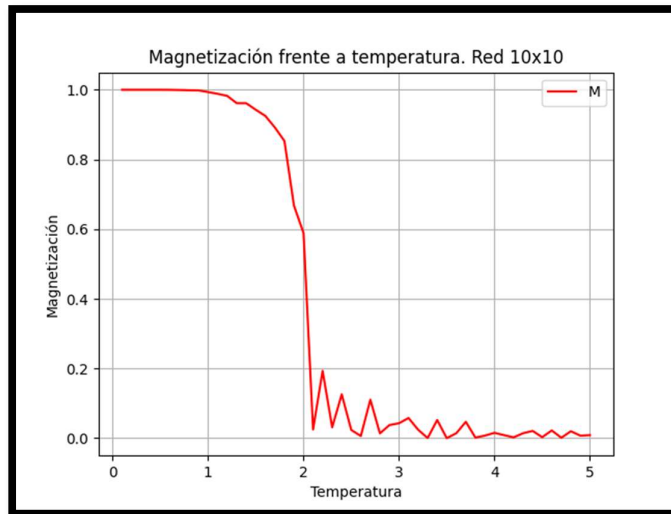
En el caso de una transición de fase de segundo orden, no hay ningún factor externo al sistema presente. En este caso, el algoritmo de Metropolis se utiliza para estudiar la transición ferromagnética sin estímulos externos. Se realizan simulaciones a diferentes temperaturas, recolectando datos estadísticos y analizando las propiedades del sistema.

En el caso de una transición de fase de primer orden, por otro lado, se considera la presencia de un campo magnético externo en el modelo de Ising. Esto puede inducir una coexistencia de fases con diferentes orientaciones magnéticas y cambios abruptos en las propiedades físicas del sistema al cruzar el punto crítico. El algoritmo de Metropolis se aplica para simular el sistema en presencia del campo magnético externo, variando su intensidad y observando los cambios en las propiedades del sistema.

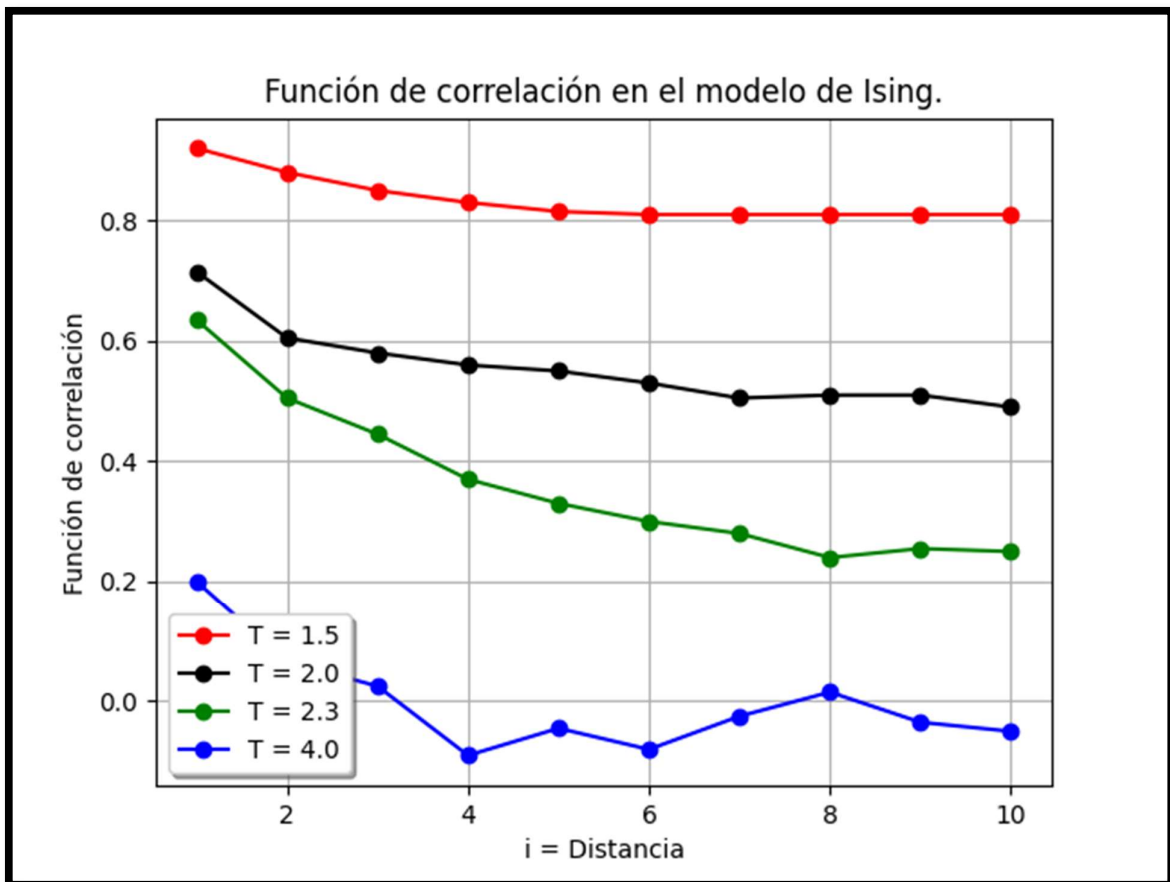
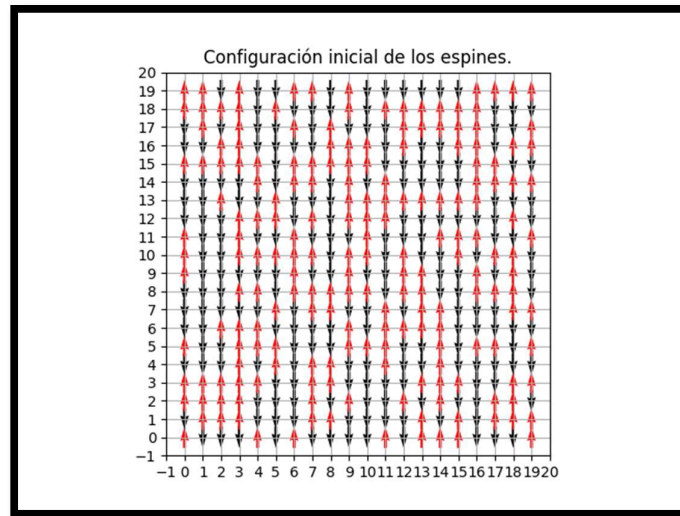
- **Resultados:** A continuación, la graficación de distintas comparativas estudiadas en el modelo de Ising tanto de primer como de segundo orden.

MODELO DE ISING DE SEGUNDO ORDEN - RED 10 x 10

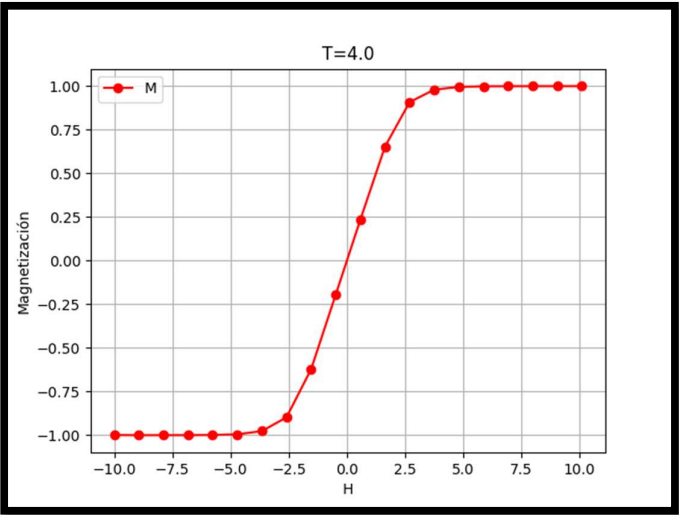
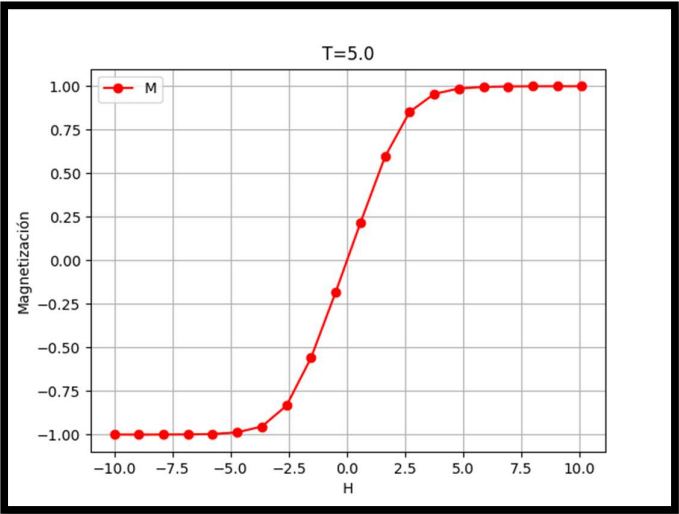
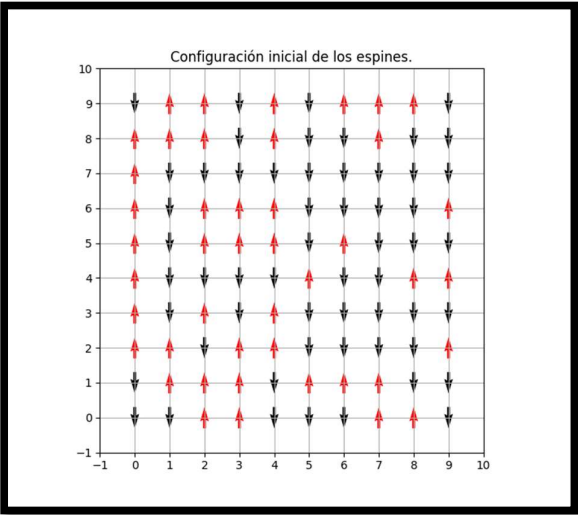


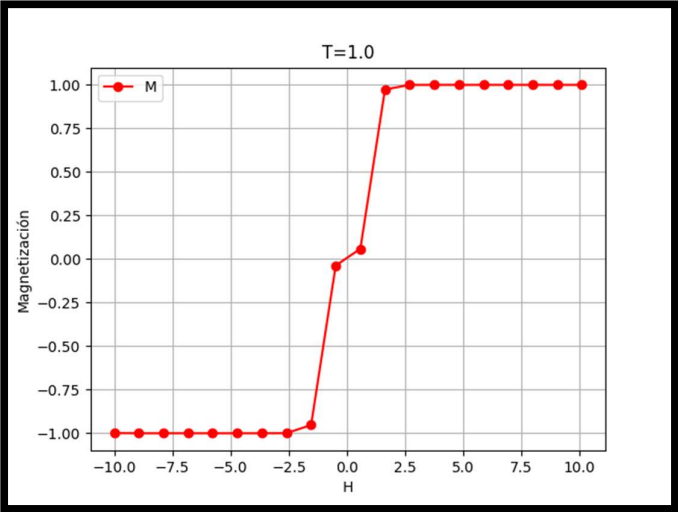
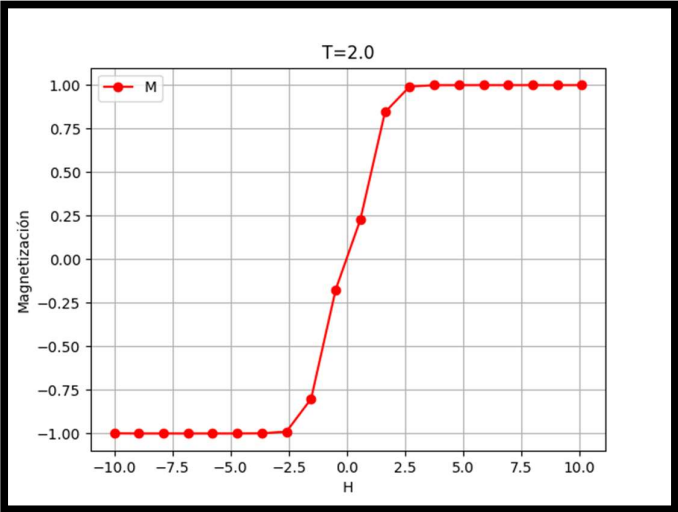
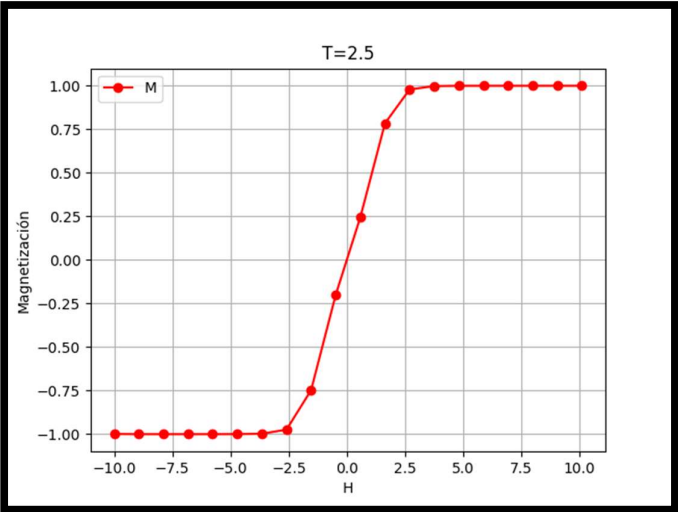


MODELO DE ISING DE SEGUNDO ORDEN - ESTUDIO DE CORRELACIÓN - RED 20 x 20



MODELO DE ISING DE PRIMER ORDEN - RED 10 x 10





VALOR ESTIMADO DE BETA (ORDEN II)	0'433257
TEMPERATURA CRÍTICA (ORDEN II)	2'105 °C

- **Discusión de los resultados:**

En el caso de las transiciones de fase de segundo orden en el modelo de Ising, sin la presencia de un campo magnético externo, las simulaciones con el algoritmo de Metropolis muestran cambios continuos en las propiedades del sistema al cruzar la temperatura crítica. La magnetización y la energía promedio (por espín) varían respecto a la temperatura de manera más suave frente a las transiciones de primera fase.

Respecto a la temperatura crítica del sistema, por otro lado, obsérvese la notable variación en la magnetización a lo largo del tiempo cuando la temperatura estudiada oscila sobre $T = 2$. En el resto de los gráficos, se visualizan alteraciones en los parámetros, susceptibilidad magnética, calor específico y energía promedio, cuando el valor de la temperatura oscila sobre el posible punto crítico.

Debido a las fluctuaciones térmicas que ocurren, el sistema refleja una mayor capacidad de absorción de energía cerca de la transición de fase, y por tanto cerca del punto crítico. El calor específico puede divergir o exhibir un pico pronunciado, observándose la segunda posibilidad en la gráfica analizada.

La susceptibilidad magnética también puede mostrar un comportamiento característico cerca de la temperatura crítica. Cerca de la temperatura crítica, la susceptibilidad magnética puede divergir, lo que indica una mayor respuesta magnética del sistema en una transición de fase.

Sabemos que las configuraciones de los espines y, por tanto, las interacciones energéticas entre ellos cambian cuando el sistema atraviesa una transición de fase. Dicha variación en las interacciones energéticas entre espines resulta en el cambio de energía promedio que observamos en la gráfica.

Además, sabemos que a medida que nos acercamos a la temperatura crítica desde ambos lados, las correlaciones espaciales tienden a volverse más largas y extendidas. Nótese el reducido espacio entre $T = 1.5$ y $T = 2$ cuando se compara con la distancia entre las correlaciones de $T = 2$ y $T = 2.3$.

Estas observaciones son corroboradas mediante el cálculo analítico mostrado al final del apartado de resultados.

Al estudiar las transiciones de fase de primer orden en el modelo de Ising utilizando el algoritmo de Metropolis, se observa que la aplicación de un campo magnético externo induce una transición discontinua. En el momento que aparece la intensidad del campo magnético, en cantidades mínimas, se produce un cambio abrupto en las propiedades físicas del sistema. Esto puede observarse en la comparativa de la magnetización frente a la intensidad del campo magnético externo (H). Destaca la velocidad del cambio provocado por el campo magnético frente al provocado por la temperatura crítica en transiciones de segundo orden.

Respecto a la temperatura, nótese que la radicalidad del cambio aumenta con el descenso de la temperatura inicial (T), por lo que podríamos determinar la reducción en la importancia del punto crítico en transiciones de primer orden frente a transiciones de segundo orden.