

Simulación del Modelo de Ising Bidimensional: Algoritmo de Metrópolis y Transiciones de Fase*

Escobar Matzir, Ricardo José Manuel, 202002342^{1,**}

¹Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de San Carlos de Guatemala, Zona 12, Guatemala.

En este trabajo, simulamos el modelo de Ising bidimensional utilizando el algoritmo de Metropolis para estudiar las transiciones de fase en sistemas magnéticos. Las simulaciones incluyen análisis del sistema en diferentes regímenes de temperatura—bajas, medias y altas—para observar las transiciones de fase y compararla con la temperatura crítica teórica. Además, exploramos propiedades termodinámicas, como la magnetización y la susceptibilidad magnética cerca de la temperatura crítica. Los resultados muestran una clara transición de fase desde una fase ferromagnética, donde los espines se alinean a bajas temperaturas, hasta una fase paramagnética, donde los espines están desordenados a altas temperaturas. Los valores obtenidos de los exponentes críticos ($\gamma = 1/8$ para la magnetización y $\varepsilon = 7/4$ para la susceptibilidad) concuerdan bien con las predicciones teóricas, validando la precisión de las simulaciones. También estudiamos los efectos de las condiciones iniciales (arranque caliente y frío) sobre el equilibrio del sistema, observando que un estado inicial desordenado requiere más tiempo para alcanzar el equilibrio.

I. INTRODUCCIÓN

El modelo de Ising en una dimensión es uno de los pocos sistemas de partículas interactuantes para los cuales se conoce una solución exacta, y es, sin duda, el más sencillo de todos ellos. Este modelo es de gran interés por varias razones. Por un lado, fue clave en la historia de la comprensión del ferromagnetismo y de las transiciones de fase, desempeñando un papel crucial en este contexto. Por otro lado, el método de solución en una dimensión desarrollado por Ising, y posteriormente extendido a dos dimensiones por Onsager, ha sentado las bases para muchos métodos modernos en la física estadística de fenómenos críticos. Por último, hoy en día se reconoce que el modelo de Ising, así como sus generalizaciones, son útiles para describir una amplia gama de fenómenos, no solo en física, sino también en diversas áreas de la biología [2].

En este trabajo se busca simular una red de $L \times L$ espines a través del algoritmo de Metropolis mediante métodos de Monte Carlo. Estas simulaciones incluyen analizar el sistema a temperaturas bajas, medias y altas. De esta manera buscamos observar una transición de fase y comparar con el valor teórico de la temperatura en que ocurre este cambio. Asimismo, estudiar el comportamiento de propiedades termodinámicas cerca de esta temperatura crítica.

II. ANTECEDENTES

A. Modelo de Ising en 2D

El Modelo de Ising en 2D es una herramienta fundamental en la física estadística para estudiar transiciones de fase, especialmente la transición ferromagnética en materiales magnéticos. El modelo de Ising fue inventado por el físico Wilhelm Lenz (1920), que lo concibió como un problema para su alumno Ernst Ising para demostrar que el sistema presentaba una transición de fase. Ising (1925) demostró que en una

dimensión no existía tal transición de fase, resolviéndolo en su tesis de 1924 [3].

En el modelo de Ising bidimensional, consideramos una cuadrícula o *red* de $L \times L$ sitios, donde cada sitio i tiene un espín s_i que puede tomar uno de los dos valores: $s_i = \pm 1$ que llamamos espín arriba ($s_i = +1$) o espín abajo ($s_i = -1$). Estos espines interactúan con sus vecinos más cercanos en la cuadrícula. El objetivo es estudiar cómo se alinean los espines bajo diferentes temperaturas y cómo cambian cuando se aplica un campo magnético externo. Para describir el comportamiento del sistema, la energía total, o Hamiltoniano, del sistema se expresa como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad (1)$$

Donde

- J es la constante de interacción entre espines vecinos.
 - Si $J > 0$, la interacción es ferromagnética, lo que implica que los espines tienden a alinearse en la misma dirección.
 - Si $J < 0$, la interacción es antiferromagnética, los espines tienden a alinearse en direcciones opuestas.
- $\langle i, j \rangle$ Denota la suma sobre pares de espines vecinos.
- H Es el campo magnético externo aplicado al sistema.
- s_i y s_j Representan los espines en los sitios i y j que toman valores ± 1 .

El comportamiento macroscópico del sistema puede analizarse a través de la función de partición Z , que contiene toda la información estadística del sistema. La función de partición se define como:

$$Z = \sum_s e^{-\beta H}$$

donde $\beta = 1/k_B T$, con k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura. La función de partición es crucial porque permite calcular otras cantidades de interés, como la

* Física computacional

** e-mail: ricardoemf03@gmail.com

energía libre, la magnetización, susceptibilidad, entre otras. Estas cantidades pueden ser calculadas de la siguiente manera.

Magnetización

La magnetización es la medida del momento magnético neto del sistema y se calcula como:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_i s_i \quad (2)$$

Calor específico C_v

El calor específico es una medida de cómo cambia la energía del sistema con la temperatura, y está relacionado con las fluctuaciones de la energía. Puede ser calculado como:

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = \frac{\beta}{T} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (3)$$

Susceptibilidad magnética χ

La susceptibilidad magnética indica el grado de sensibilidad a la magnetización de un material influenciado por un campo magnético. Puede obtenerse a partir de:

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (4)$$

Transición de fase

En el modelo de Ising en 2D, la transición de fase se da a una temperatura crítica T_c donde el sistema pasa de un estado magnetizado (espines alineados, $M \neq 0$) a un estado desordenado (magnetización nula, $M = 0$). Para el modelo sin campo magnético ($H = 0$) Lars Onsager resolvió exactamente el modelo [1], encontrando que la temperatura crítica está dada por:

$$k_B T_c = \frac{2J}{\ln(\sqrt{2} + 1)} \quad (5)$$

B. Algoritmo de Metrópolis

El algoritmo de Metropolis es una técnica utilizada para simular sistemas físicos como el Modelo de Ising en 2D, especialmente cuando se busca calcular propiedades termodinámicas mediante métodos de Monte Carlo. Este algoritmo es particularmente eficaz para estudiar sistemas con muchas configuraciones posibles, donde el cálculo directo de la función de partición sería computacionalmente muy difícil o bien imposible.

El objetivo del algoritmo de Metropolis es crear configuraciones del sistema que se alineen con la distribución de Boltzmann a una temperatura determinada. La idea es explorar el espacio de configuraciones de forma eficiente, generando configuraciones más probables con mayor frecuencia que las menos probables, lo que facilita el cálculo de propiedades promedio como la energía, la magnetización, entre otras. Este algoritmo lo podemos describir más instructivamente en la figura 1, aquí el nuevo estado S_1 representa cambiar un espín aleatorio al sistema (i.e. cambiar +1 por -1 o viceversa).

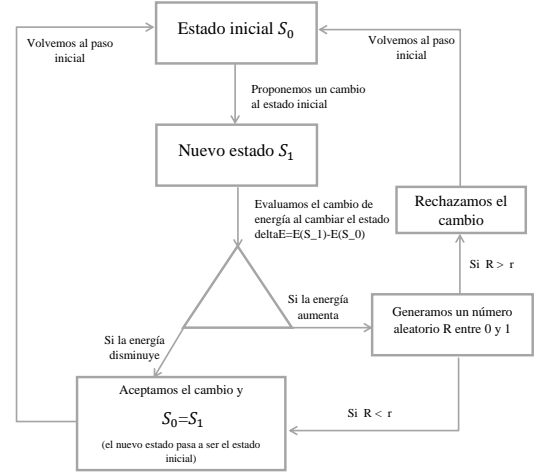


Figura 1: Algoritmo de Metropolis

En el algoritmo, r es el cambio de la energía (probabilidad) al cambiar de estado, y está dado por

$$r = \frac{p(S_f)}{p(S)} = e^{-\beta(E(S_1) - E(S_0))} = e^{-\beta \Delta E} \quad (6)$$

C. Implementación del algoritmo para calcular propiedades termodinámicas

En Python implementamos el algoritmo de Metropolis descrito en 1 y calculamos la energía, magnetización, calor específico y susceptibilidad de acuerdo a (1), (2), (3) y (4), respectivamente. Estas magnitudes físicas las calculamos para temperaturas bajas hasta temperaturas altas para observar dónde es que ocurre una transición de fase.

Condiciones

- $L = 10$
- $J = 1$
- $H = 0$
- Tiempo de termalización: $2^{13} = 8192$. Repeticiones del algoritmo de Metropolis hasta que el sistema alcance el equilibrio.
- Consideramos dos casos: Un arranque caliente, con todos los espines de la red aleatorios y un arranque frío, todos los espines iguales (ya sea +1 o -1).
- Para esta configuración, la temperatura crítica teórica es $T_c \approx 2.26918$

D. Comportamiento del calor específico C_v y la susceptibilidad χ en las cercanías de la temperatura crítica T_c

La magnetización cerca (pero aún por debajo) de la temperatura crítica está dada por

$$\frac{\langle M \rangle}{L^2} \sim (T_c - T)^\gamma \quad (7)$$

con $\gamma = 1/8$ y $T \in [T_c - 0.5, T_c - 0.01]$ con un total de 80 valores en dicho intervalo. Con el algoritmo de Metropolis analizamos la magnetización en este rango de temperaturas en el cual trazamos $\langle M \rangle$ contra $T_c - T$ para determinar numéricamente el valor de γ .

De forma totalmente análoga, la susceptibilidad cerca de la temperatura crítica se comporta como

$$\frac{\chi}{L^2} \sim |T_c - T|^\varepsilon \quad (8)$$

con $\varepsilon = 7/4$ y el mismo rango de temperaturas cerca de la temperatura crítica. De manera similar determinamos numéricamente el valor de ε .

E. Ajuste lineal en $\log - \log$ para determinar γ y ε

Dado que necesitamos determinar el valor de exponentes en funciones (7) y (8), tendremos un problema del tipo

$$y = x^n$$

donde la incógnita a determinar es el valor de n . Entonces es conveniente trabajar la función en un sistema $\log - \log$ dado que

$$\log(y) = n \log(x)$$

entonces el problema se reduce a realizar un ajuste lineal en el cual se debe determinar el valor de la pendiente n que precisamente es el exponente que necesitamos.

III. RESULTADOS

A. Arranque caliente

Las gráficas 2, 3, 4 y 5 (en rojo) corresponden a las magnitudes físicas, energía, magnetización, calor específico y susceptibilidad magnética respectivamente. Estos corresponden a un arranque caliente en la red, es decir, los espines están orientados al azar (espines 'arriba' y 'abajo' distribuidos aleatoriamente), representando un estado paramagnético desordenado con magnetización promedio cercana a cero. Dado que el sistema inicialmente desordenado puede tardar más tiempo en alcanzar el estado ordenado, especialmente con simulaciones con tiempo limitado (como es nuestro caso al elegir un tiempo de termalización bajo).

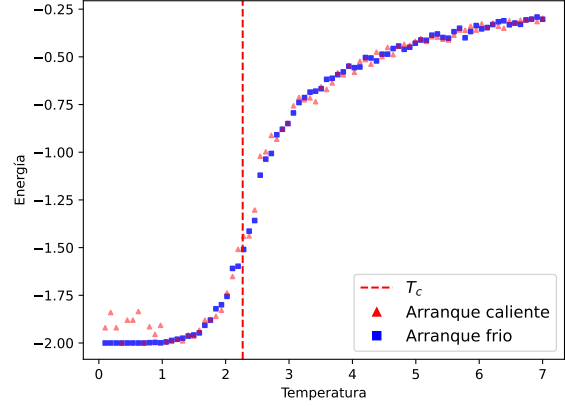


Figura 2: Energía promedio vs temperatura para un arranque caliente en la red.

A temperaturas bajas, los espines deberían tender a alinearse, esto se evidencia en la gráfica de la magnetización 3. Sin embargo, al haber iniciado en un estado desordenado, al sistema le es difícil alcanzar el equilibrio y se observa que existe una tendencia a alcanzar una magnetización total de +1 (fase ferromagnética) a temperaturas bajas, pero esto no se alcanza del todo debido arranque caliente del sistema.

Por otra parte, en todas las gráficas se observa un cambio abrupto justo en la temperatura crítica teórica $T_c \approx 2.26918$. Esto era de esperarse y es evidencia del correcto funcionamiento de las simulaciones realizadas. Esto indica que existe una *transición de fase* entre la fase ferromagnética (bajas temperaturas) en la que todos los espines tienen una alineación y la fase paramagnética (altas temperaturas) en la cual los espines están completamente desordenados y reflejan un estado de alta entropía.

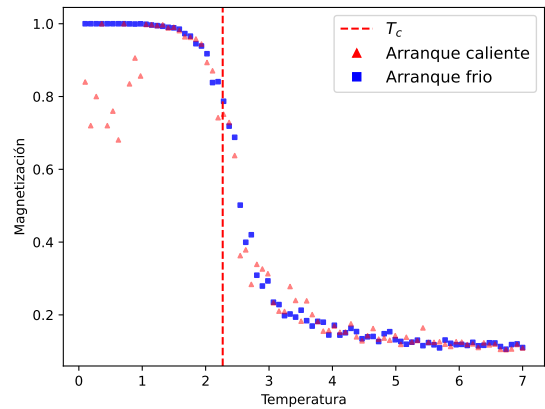


Figura 3: Magnetización promedio vs temperatura para un arranque caliente en la red.

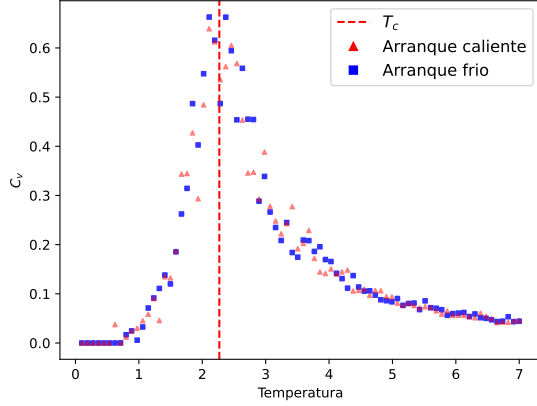


Figura 4: Capacidad calorífica vs temperatura para un arranque caliente en la red.

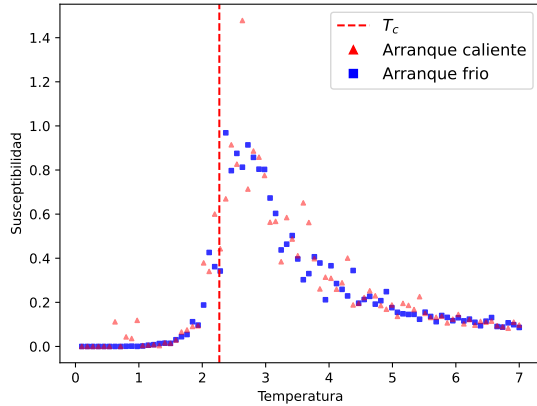


Figura 5: Susceptibilidad magnética vs temperatura para un arranque caliente en la red.

B. Arranque frío

Las gráficas 2, 3, 4 y 5 (en azul), corresponden a las magnitudes físicas calculadas esta vez con un arranque frío. Es decir, en esta ocasión los espines al inicio están perfectamente alineados (todos con +1). Las diferencias en contraste con el arranque caliente son evidentes especialmente a bajas temperaturas donde, por ejemplo, la magnetización es perfectamente +1 a temperaturas por debajo de T_c (figura 3, en azul). Esto también se anticipaba debido que iniciamos con una configuración completamente ordenada (un estado de baja entropía), el sistema ya se encuentra en equilibrio.

En cada una de las gráficas también es evidente una transición de fase justamente en T_c . El calor específico tiene un pico en la temperatura crítica lo que significa que el sistema presenta máximas fluctuaciones energéticas esto por como se ha definido C_v en (3). Una pequeña variación en la temperatura produce un cambio grande en la energía interna del sistema,

reflejando una alta capacidad para almacenar o liberar calor.

C. Transición de fase ferromagnética

Aquí ahora lo que nos interesa es estudiar cómo se comporta la magnetización y la susceptibilidad magnética en las cercanías de la temperatura crítica, justo donde sucede una transición de fase ferromagnética a paramagnética.

1. Magnetización cerca de la temperatura crítica

Como se discutió en la sección anterior, el objetivo es determinar el exponente del ajuste para así encontrar el comportamiento que tiene la magnetización cerca de T_c . En la figura 6 trazamos la magnetización para valores cercanos a T_c , la curva roja indica el ajuste teórico. En la figura 7, en un gráfico log – log realizamos el ajuste línea y encontramos que $\gamma = 0.125$ en completa concordancia con el valor teórico de $\gamma = 1/8$.

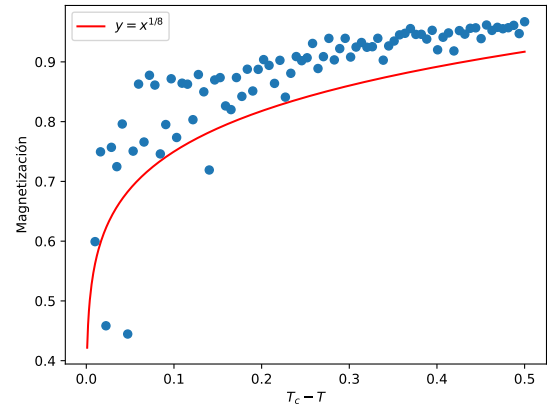


Figura 6: Magnetización cerca de la temperatura crítica (en azul) y ajuste teórico (en rojo).

2. Susceptibilidad cerca de la temperatura crítica

De forma análoga a la magnetización en T_c , en la figura 8 vemos como varía la susceptibilidad en las cercanías de la temperatura crítica, la curva sólida indica el comportamiento teórico. Por su parte, el gráfico 9 del ajuste muestra que el valor de $\varepsilon \approx 1.736$ que concuerda bien con el valor teórico de $\varepsilon = 7/4 = 1.75$.

IV. CONCLUSIONES

Hemos simulado el modelo ising bidimensional utilizando el algoritmo de Metropolis para estudiar las

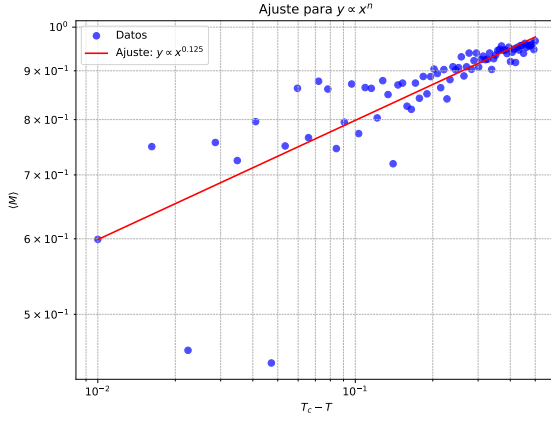


Figura 7: Ajuste lineal para la magnetización cerca de la temperatura crítica en un gráfico log – log

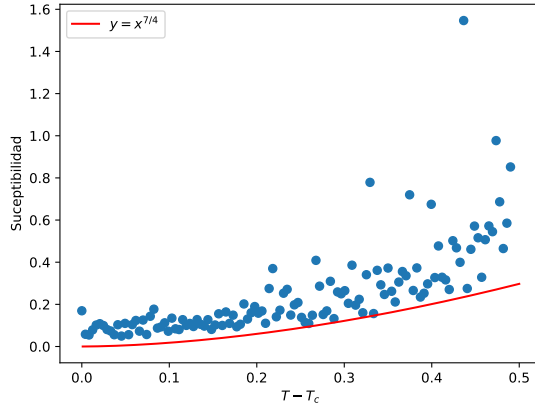


Figura 8: Susceptibilidad cerca de la temperatura crítica (en azul) y ajuste teórico (en rojo)

transiciones de fase en sistemas magnéticos. Es a partir de estas simulaciones que hemos observado cambios claros en

las propiedades termodinámicas cerca de la temperatura crítica teórica $T_c \approx 2.26918$ lo cual muestra una evidencia clara de una transición de fase. Además, esto confirma la correcta implementación del algoritmo y su utilidad para describir estos fenómenos físicos.

El sistema pasa de una fase ferromagnética a bajas temperaturas, donde los espines están alineados, a una fase paramagnética a altas temperaturas, donde los espines se encuentran desordenados. La magnetización y la susceptibilidad magnética mostraron un comportamiento en concordancia con los valores teóricos de los exponentes críticos ($\gamma = 1/8$ y $\varepsilon = 7/4$), lo cual valida la precisión de nuestras simulaciones.

Adicionalmente, el estudio de las configuraciones iniciales del sistema (arranque frío y arranque caliente) demostró cómo la condición inicial puede afectar el tiempo de termalización y

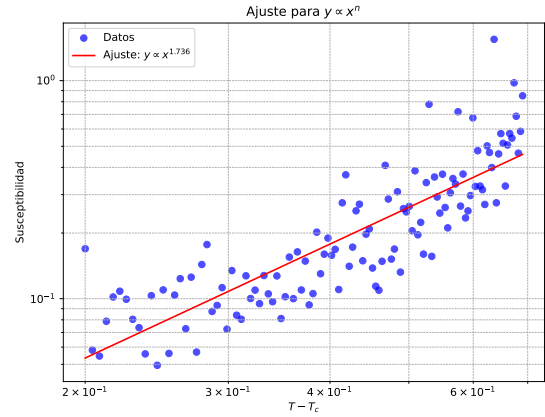


Figura 9: Ajuste lineal para la susceptibilidad cerca de la temperatura crítica en un gráfico log – log

la convergencia hacia el equilibrio. En el arranque caliente, el sistema tarda más en alcanzar una configuración ordenada debido a la mayor desorganización inicial de los espines.

V. ANEXO

El código se puede consultar en el siguiente [enlace](#).

[1] Stephen J. Blundell and Katherine M. Blundell. *Concepts in Thermal Physics*. Oxford University Press, Oxford, 2 edition, 2010.

[2] Sergio A. Cannas. El modelo de ising, 2010. Notas de Termodinámica II, FaMAF, Universidad Nacional de Córdoba.
[3] Wikipedia, la enciclopedia libre. Modelo de ising. https://es.wikipedia.org/wiki/Modelo_de_Ising, 2024. Consultado el 27 de noviembre de 2024.