

Explorando el Modelo de Ising: Simulaciones Montecarlo en 2D y 3D

Santiago Ruiz Piedrahita*

*Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.*

(Dated: March 29, 2025)

El modelo de Ising es una representación fundamental en física estadística para describir sistemas magnéticos y transiciones de fase. En este trabajo, se implementan simulaciones de Montecarlo para estudiar su comportamiento en redes bidimensionales y tridimensionales. Se analizan la evolución de la energía, magnetización, susceptibilidad magnética y capacidad calorífica, tanto en ausencia como en presencia de un campo magnético externo, permitiendo caracterizar el impacto del campo en la transición de fase y en la respuesta del sistema.

Palabras clave: Modelo de Ising, Método de Montecarlo, Transición de fase.

I. INTRODUCCIÓN

Los modelos de sistemas con variables interactivas han sido fundamentales para comprender fenómenos físicos complejos. Uno de los modelos más estudiados en física estadística es el modelo de Ising, originalmente propuesto por Lenz y posteriormente analizado por su estudiante de posgrado, Ernst Ising [1]. Este modelo fue desarrollado con el propósito de describir la transición de fase entre un material paramagnético y uno ferromagnético.

El análisis inicial del modelo en una dimensión mostró que no presenta una transición de fase. Sin embargo, estudios posteriores demostraron que en dos y tres dimensiones, el modelo de Ising sí exhibe un comportamiento crítico, marcando un cambio de fase bien definido [2, 3]. Estas características han convertido al modelo en una herramienta clave para el estudio de la termodinámica de sistemas magnéticos y otras áreas, como la mecánica estadística y la teoría de redes [4].

Dado que el modelo de Ising no puede resolverse de manera exacta en dimensiones superiores a uno, se han desarrollado diversos métodos computacionales para analizar su comportamiento. Entre ellos, los métodos de Montecarlo han sido especialmente exitosos, permitiendo la simulación eficiente del sistema mediante algoritmos como Metrópolis, que facilitan la exploración de sus propiedades termodinámicas [4, 5].

En este trabajo, se implementa una simulación del modelo de Ising en dos dimensiones y una aproximación utilizando el método de Montecarlo. Se estudian las propiedades del sistema, como la magnetización y la energía interna, y se analiza el comportamiento del sistema en función de la temperatura para identificar la transición de fase.

II. MODELO DE ISING

Un sistema ferromagnético típico, como el hierro o el níquel, exhibe magnetización espontánea en ausencia de un campo magnético externo. Sin embargo, este orden magnético solo ocurre a temperaturas inferiores a una temperatura crítica bien definida, conocida como temperatura de Curie T_c . Para temperaturas $T > T_c$, la magnetización desaparece, marcando la transición entre la fase desordenada y la fase ferromagnética [4].

A. Descripción del modelo

El sistema consiste en una red de N espines, donde cada espín puede tomar valores $\sigma_i = \pm 1$. La dinámica del sistema está determinada por la interacción entre los espines vecinos y un campo magnético externo h . La energía total del sistema está dada por el Hamiltoniano del modelo de Ising:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

donde J es la *constante de acoplamiento* o *integral de intercambio*, que representa la fuerza de interacción entre los espines vecinos. Si $J > 0$, la interacción es ferromagnética (los espines tienden a alinearse); si $J < 0$, la interacción es antiferromagnética (los espines tienden a orientarse en direcciones opuestas). $\langle i, j \rangle$ indica la suma sobre pares de sitios vecinos en la red y h representa el campo magnético externo aplicado al sistema [3].

En el contexto de la mecánica estadística, la probabilidad de que el sistema se encuentre en un estado con energía \mathcal{H} sigue la distribución de Boltzmann:

* santiago.ruizp@udea.edu.co

$$P(S) = \frac{e^{-\mathcal{H}/K_B T}}{Z}$$

donde K_B es la constante de Boltzmann y Z es la función de partición:

$$Z = \sum_S e^{-\mathcal{H}/K_B T}$$

donde la suma recorre todas las posibles configuraciones de espines del sistema.

B. Propiedades térmicas del modelo de Ising

Con la expresión de la función de partición, es posible obtener diversas variables físicas de interés en el estudio de materiales magnéticos. Como la magnetización total M , el calor específico C_v y la susceptibilidad magnética χ son cantidades sencillas de calcular dentro del marco de la Mecánica Estadística.

La magnetización total del sistema, que mide la alineación promedio de los espines, se define como:

$$M = \sum_i \sigma_i. \quad (2)$$

La capacidad calorífica, que describe cómo varía la energía interna del sistema con la temperatura, está dada por:

$$C_v = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (3)$$

donde E es la energía total del sistema.

La susceptibilidad magnética, que mide la respuesta del sistema a un campo magnético externo, se define como:

$$\chi = \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (4)$$

Las ecuaciones anteriores muestran cómo las fluctuaciones de la energía y la magnetización están directamente relacionadas con las funciones de respuesta del sistema, lo que permite caracterizar la transición de fase en el modelo de Ising [4].

III. ALGORITMO DE MONTECARLO

El método de Monte Carlo es una técnica ampliamente utilizada para simular sistemas físicos y estudiar su comportamiento térmico. En el caso del modelo de Ising, se emplea el algoritmo de Metropolis [6], un esquema de muestreo de importancia que permite generar configuraciones de espines de acuerdo con la distribución de probabilidad del sistema en equilibrio térmico.

A. Método de Metropolis

El algoritmo de Metropolis genera una secuencia de configuraciones a partir de un estado inicial mediante una probabilidad de transición que depende de la diferencia de energía entre el estado inicial y el estado final [4].

El procedimiento básico del método de Metropolis se describe a continuación:

1. **Elección de un estado inicial:** Se establece una configuración inicial de los espines del sistema, que puede ser completamente aleatoria o con una alineación inicial determinada.
2. **Selección de un sitio:** Se elige aleatoriamente un espín σ_i en la red.
3. **Cálculo de la variación de energía:** Se calcula la diferencia de energía ΔE que resultaría si el espín seleccionado se invierte:

$$\Delta E = 2J\sigma_i \left(\sum_{\langle j \rangle} \sigma_j + h \right), \quad (5)$$

donde la suma se realiza sobre los espines vecinos σ_j .

4. **Generación de un número aleatorio:** Se genera un número aleatorio r tal que $0 < r < 1$.
5. **Criterio de aceptación:** Si el cambio de energía es negativo ($\Delta E < 0$), la inversión del espín se acepta automáticamente. En caso contrario, el espín solo se invierte con una probabilidad dada por el factor de Boltzmann:

$$P = e^{-\Delta E/k_B T}. \quad (6)$$

Si $r < P$, se invierte el espín σ_i ; de lo contrario, se mantiene sin cambios.

6. Repetición del proceso: Se selecciona otro sitio y se repiten los pasos anteriores hasta alcanzar el equilibrio térmico.

Este procedimiento se ejecuta durante un número suficiente de pasos para garantizar que el sistema alcance una distribución de equilibrio acorde con la temperatura.

IV. SIMULACIONES Y ANÁLISIS

Para analizar el comportamiento del modelo de Ising, se realizaron simulaciones utilizando el algoritmo de Metropolis en una red de tamaño $L = 60$ con un número total de pasos igual a $2000 \times L$. Este valor fue determinado tras un análisis previo para garantizar una adecuada relajación del sistema. Se trabajó con unidades naturales, donde $J = 1$, temperatura adimensional y condiciones de frontera tanto periódicas como libres.

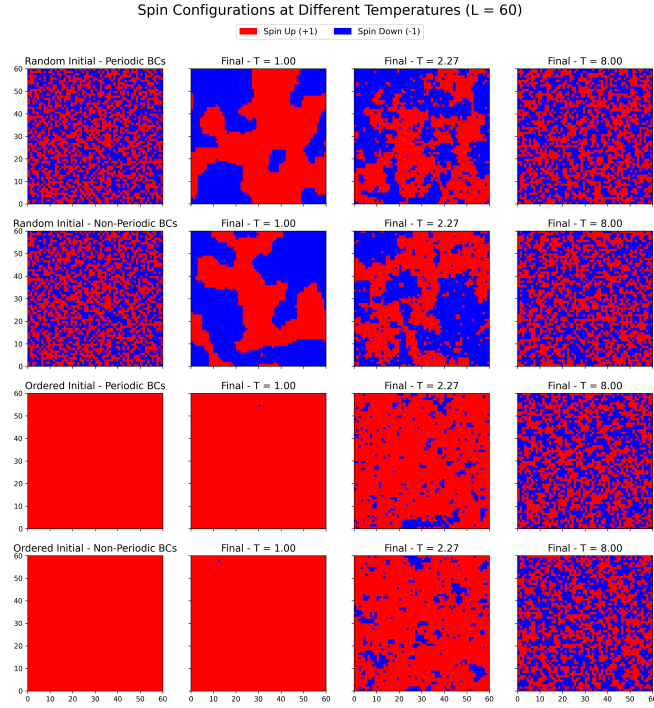


FIG. 1. Configuraciones iniciales junto con la evolución final del sistema para las diferentes temperaturas y las diferentes condiciones iniciales planteadas.

En la primera parte del análisis, se consideraron dos tipos de configuraciones iniciales: una aleatoria y otra completamente ordenada. Además, se estudió la evolución del sistema bajo condiciones de frontera periódicas y libres para tres valores característicos de temperatura: $T = 1$, $T = 2.27$ (próxima a la temperatura crítica T_c , obtenida a través de la relación de Onsager [2]), y $T = 8$.

Se presenta en la Figura 1 en la que se ilustran las configuraciones iniciales junto con la evolución final del sistema para cada temperatura. La disposición de la figura es la siguiente: Las filas corresponden a:

- (1) configuración inicial aleatoria con condiciones periódicas, (2) configuración inicial aleatoria con condiciones libres, (3) configuración inicial ordenada con condiciones periódicas, y (4) configuración inicial ordenada con condiciones libres.

Las columnas representan: (1) la configuración inicial, (2) el estado final a $T = 1$, (3) el estado final a $T = 2.27$, y (4) el estado final a $T = 8$.

Los resultados obtenidos concuerdan con el comportamiento esperado del sistema.

Para $T = 1$, que es menor que T_c , el sistema tiende a un estado ordenado en las configuraciones iniciales ordenadas (tercera y cuarta fila) o a formar regiones de espines alineados en las configuraciones iniciales aleatorias (primeras dos filas). Para $T \approx T_c = 2.27$, se observa un estado intermedio con regiones ordenadas y desordenadas, característico de una transición de fase. Para $T = 8$, mucho mayor que T_c , el sistema alcanza un estado completamente desordenado, como era de esperarse.

En la Figura 2 se presentan los resultados de la energía media $\langle E \rangle$ y la magnetización media $\langle M \rangle$ en función de la temperatura T . En primer lugar, se analiza el caso sin campo externo, considerando únicamente configuraciones iniciales ordenadas para comparar las diferencias entre condiciones de frontera periódicas y libres. Se observa que no hay una diferencia significativa entre ambas, excepto por un ligero corrimiento en la energía, que es muy bajo.

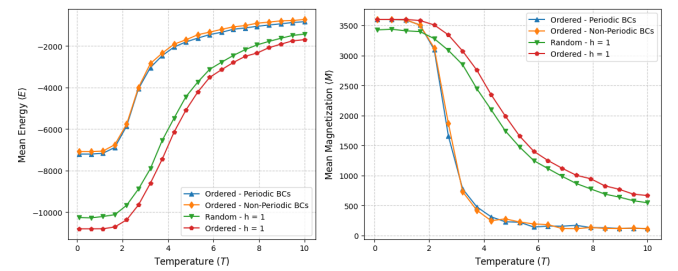


FIG. 2. Energía media $\langle E \rangle$ y la magnetización media $\langle M \rangle$ en función de la temperatura T .

Asimismo, se presenta el caso en el que se introduce un campo externo $h = 1$, comparando configuraciones iniciales ordenadas y aleatorias, sin observar diferencias notables entre ellas. En la energía, se nota que para temperaturas bajas los valores son más altos en presencia de campo, mientras que para temperaturas altas todos los sistemas tienden a $\langle E \rangle = 0$. En la magnetización, la presencia del campo genera una transición de fase más

suave en comparación con el caso sin campo, donde el cambio de fase es más pronunciado.

En la Figura 3 se muestran los resultados de la capacidad calorífica C_v y la susceptibilidad magnética χ en función de la temperatura. Sin campo, se observa un pico en la temperatura crítica T_c , característico de la transición de fase del modelo de Ising. Al aplicar el campo externo, el pico de la capacidad calorífica se desplaza hacia temperaturas más altas y disminuye en intensidad, mientras que el pico en la susceptibilidad desaparece por completo, lo que indica que el sistema deja de presentar una transición de fase bien definida.

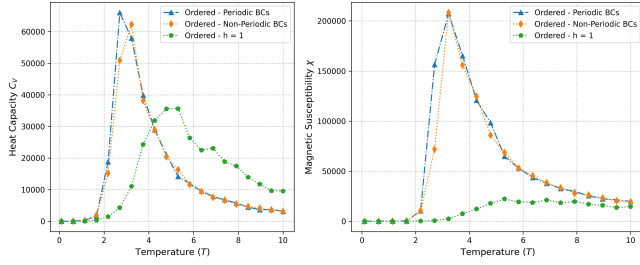


FIG. 3. Capacidad calorífica C_v y la susceptibilidad magnética χ en función de la temperatura T .

Para estos resultados, se mantuvo el tamaño de la red en $L = 60$ y se realizaron simulaciones con el mismo número de pasos de Montecarlo, almacenando en cada iteración los valores de energía y magnetización para luego promediarlos. La temperatura se varió en una escala lineal entre $T = 0.1$ y $T = 10$, tomando 20 puntos en total. En ausencia de campo, se compararon únicamente las condiciones de frontera para un sistema ordenado, mientras que en presencia de campo se analizaron configuraciones periódicas con sistemas iniciales tanto aleatorios como ordenados. Todas las cantidades se presentan en unidades adimensionales. La magnetización total M se define como la suma de todos los espines del sistema, sin normalización, al igual que la capacidad calorífica y la susceptibilidad magnética.

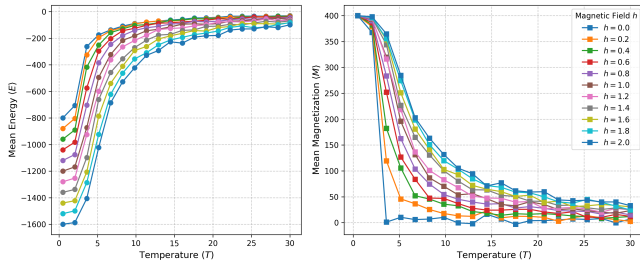


FIG. 4. Energía media $\langle E \rangle$ y la magnetización media $\langle M \rangle$ en función de la temperatura T para diferentes valores de campo magnético h .

Ahora se estudia el efecto de variar el campo externo h en el modelo de Ising. Para este análisis, se ha cambiado

el tamaño de la red a $L = 20$ debido a la cantidad de puntos analizados. Se mantiene el mismo número de pasos y condiciones periódicas, se consideran 21 valores de h entre -2 y 2, con cada punto evolucionando de manera independiente. En la Figura 4, se presenta la magnetización en función de la temperatura $M(T)$. Se observa que al aumentar h , la transición de fase se vuelve más suave.

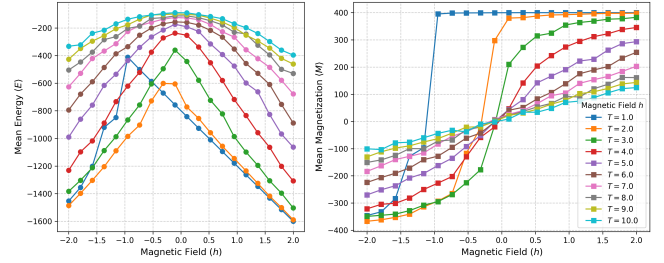


FIG. 5. Energía media $\langle E \rangle$ y la magnetización media $\langle M \rangle$ en función del campo magnético h para diferentes valores de temperatura T .

Además, se analiza la energía en función del campo $E(h)$ y la magnetización en función del campo $M(h)$ (ver Figura 5) para valores de h entre -2 y 2. Estos cálculos se realizan para diferentes temperaturas con el objetivo de identificar la posible aparición de curvas de histéresis. Para $T > T_c$, el comportamiento es paramagnético, con una respuesta en $M(h)$ que recuerda a curvas de histéresis. Para $T < T_c$, no se observan ciclos de histéresis completos debido a que, para cada punto de campo, se corre independientemente el modelo de Ising. Esto implica que no hay una correlación entre puntos consecutivos como se esperaría en una simulación con un barrido progresivo del campo externo. A pesar de esta limitación, se identifica la presencia de una magnetización remanente y un campo coercitivo, lo que permite inferir la existencia de una rama de histéresis.

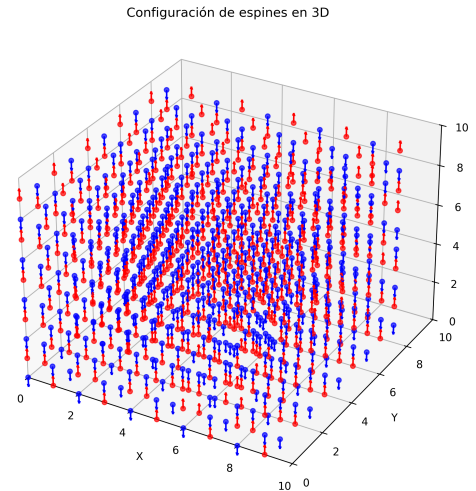


FIG. 6. Configuración final de un sistema tridimensional.

Por último, se extiende el estudio al caso tridimensional, tomando $L = 10$. En este caso, no se realizaron muchos análisis adicionales. En la Figura 6 se muestra una configuración final del sistema. Se realizó un barrido en temperatura y se observó en la Figura 7 que la energía exhibe un comportamiento similar al caso bidimensional. Sin embargo, la magnetización muestra un comportamiento inesperado, en el cual no se observa claramente la transición de fase, razón que hace necesaria un estudio más detallado sobre el caso tridimensional.

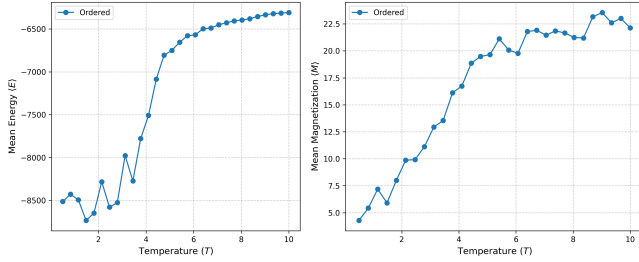


FIG. 7. Energía media $\langle E \rangle$ y la magnetización media $\langle M \rangle$ en función de la temperatura T para el caso tridimensional.

V. CONCLUSIONES

El modelo de Ising ha sido simulado exitosamente mediante el método de Montecarlo, permitiendo la caracter-

ización de sus propiedades termodinámicas en 2D y 3D. Se ha identificado la transición de fase en 2D cerca de $T_c \approx 2.27$, con cambios en la magnetización y picos en la capacidad calorífica y susceptibilidad. La inclusión de un campo externo suaviza esta transición y desplaza el pico de la capacidad calorífica.

El análisis de $M(h)$ y $E(h)$ mostró un comportamiento paramagnético para $T > T_c$, mientras que para $T < T_c$ se identificó magnetización remanente y campo coercitivo, sugiriendo la presencia de una rama de histéresis.

En 3D, la energía presentó un comportamiento similar al caso 2D, pero la magnetización no mostró claramente la transición de fase, indicando la necesidad de un estudio más detallado.

Estos resultados reafirman la utilidad del modelo de Ising en el estudio de fenómenos críticos y el impacto del campo magnético en la transición de fase.

VI. RECURSOS

El código fuente del proyecto está disponible en el siguiente repositorio de GitHub:

<https://github.com/santiagoruizp/Computacion-Avanzada/tree/main/Proyecto%20Montecarlo>

-
- [1] E. Ising, Beitrag zur theorie des ferromagnetismus, Z. Physik **31**, 253 (1925).
 - [2] L. Onsager, Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition, Physical review **65**, 117 (1944).
 - [3] H. Gould, J. Tobochnik, and W. Christian, *An introduction to computer simulation methods*, Vol. 1 (Addison-Wesley Reading, 1988).
 - [4] D. Landau and K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics* (Cambridge university press, 2021).
 - [5] A. L. Gelover-Santiago, *Simulación del modelo de Ising con el método de Monte Carlo* (Universidad Nacional Autónoma de México, 2005).
 - [6] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines, The journal of chemical physics **21**, 1087 (1953).