

Modelo de Ising en 2D

Saúl Díaz Mansilla

9 de abril de 2025

Índice

1. Introducción	2
2. Teoría	2
2.1. El modelo de Ising: introducción	2
2.2. Espines y temperatura	3
2.3. Magnetización	3
2.4. Energía	4
2.5. Calor específico	4
2.6. Campo externo: susceptibilidad	5
2.7. Entropía	6
3. Métodos numéricos	6
3.1. Algoritmo de Metrópolis	6
3.2. Generación de redes	7
4. Resultados	8
4.1. Magnetización y energía	8
4.2. Calor específico	9
4.3. Entropía	10
4.4. Teoría de escalado de tamaño finito	10
5. Conclusión	12

1. Introducción

El modelo de Ising ha sido durante décadas una herramienta fundamental en el estudio de sistemas magnéticos y transiciones de fase. A pesar de su simplicidad aparente, logra capturar de forma precisa fenómenos complejos como la transición de fase en materiales ferromagnéticos. Este modelo consiste en una red de espines con solo dos posibles orientaciones, cuya interacción está determinada por las reglas de la mecánica estadística clásica.

En este trabajo se abordará el estudio del modelo de Ising en dos dimensiones desde una perspectiva numérica, haciendo uso del algoritmo de Metropolis para simular la evolución térmica del sistema. Se analizarán magnitudes físicas relevantes como la magnetización, la energía, el calor específico, la susceptibilidad y la entropía, evaluando sus comportamientos en función de la temperatura y comparándolos con los resultados analíticos disponibles para redes infinitas. Además, se explorarán los efectos asociados al tamaño finito de la red mediante un análisis de escalado.

El objetivo principal es ilustrar cómo un modelo discreto y sencillo puede reproducir de forma realista fenómenos físicos críticos, ofreciendo una excelente plataforma para la comprensión de conceptos fundamentales en física estadística y teoría de fases.

2. Teoría

2.1. El modelo de Ising: introducción

El modelo de Ising es un modelo sencillo de ferromagnetismo que logra producir resultados muy acertados sin necesidad de considerar el formalismo cuántico al completo. Para ello se simplifica el material a una red de N espines s_i con dos orientaciones posibles: arriba (+1) y abajo (-1) y ubicados en posiciones fijas separadas una distancia igual de sus vecinos.

Consideraremos la interacción a primeros vecinos entre los espines. El sistema será más estable cuando espines adyacentes tengan la misma orientación, es decir, la energía será menor en este caso. Teniendo en cuenta un campo magnético externo que favorecerá la orientación de los espines en una cierta dirección, llegamos a una energía [1]:

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

donde J es la constante de interacción, μ es el momento magnético de cada espín, y H es el campo magnético externo. El símbolo $\langle i, j \rangle$ representa una suma sobre los vecinos.

Cabe destacar que se tomarán los valores de $J = k_B = 1$ para todas las simulaciones.

2.2. Espines y temperatura

Trabajaremos con redes de espines en dos dimensiones, de tamaño cuadrado $L \times L$. Dado que se deberían estudiar redes de tamaño muy grande para simular un material, para ahorrar cálculos, se emplearán condiciones de contorno periódicas, es decir, $s_{L+1,j} = s_{1,j}$, y en la otra dirección, $s_{i,L+1} = s_{i,1}$.

Para hacer evolucionar el sistema, dada la temperatura, se utilizará el algoritmo de Metropolis, un método estocástico diseñado para este modelo (ver sección 3.1).

2.3. Magnetización

Uno de los principales objetivos es estudiar la magnetización M del material con respecto a la temperatura. Es bien conocido que los materiales ferromagnéticos pierden sus propiedades a temperaturas elevadas. El modelo de Ising logra recrear este comportamiento, ya que muestra una *transición de fase de segundo orden*.

Esto significa que a partir de una determinada temperatura T_c el valor de la magnetización cae a 0, mientras que para valores menores está en torno a 1. Además, implica que para valores cercanos a T_c , aparecen intensas fluctuaciones en la magnetización.

El caso bidimensional, resuelto analíticamente por Lars Onsager en 1944 [2], presenta una temperatura crítica de:

$$T_c = \frac{2J}{k_B \ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,26 \frac{J}{k_B} \quad (2)$$

El comportamiento de M para valores cercanos a T_c , es decir, en la transición de fase, tiene el siguiente comportamiento, según la teoría de campo medio:

$$M(T) \sim (T - T_c)^\beta \quad (3)$$

donde β se conoce como exponente crítico, y para el modelo de Ising toma el valor de $\beta = 1/8$.

Sin embargo, la solución completa de Onsager predice la siguiente curva para la magnetización [2]:

$$M(T) = \begin{cases} (1 - \sinh^{-4} \frac{2J}{k_B T})^\beta, & \text{si } T < T_c \\ 0, & \text{si } T > T_c \end{cases} \quad (4)$$

donde $\beta = 1/8$ es el mismo exponente crítico que el anterior, y k_B es la constante de Boltzmann.

2.4. Energía

Dado que el sistema está a una cierta temperatura, la energía del sistema debe ser mayor cuanto mayor sea la temperatura. Esto se refleja en la ecuación (1) sin necesidad de añadir un término adicional que referencie la temperatura, ya que los espines estarán más desordenados en estados de mayor temperatura, por lo que la energía será mayor.

La solución de Onsager predice la siguiente expresión analítica para la energía en función de la temperatura para el caso sin campo externo [2]:

$$\frac{E(T)}{N} = -J \coth \Theta \left[1 + \frac{\pi}{2} (2 \tanh^2 \Theta - 1) K(k) \right] \quad (5)$$

donde $\Theta \equiv 2J/k_B T$ y $K(k)$ es la integral elíptica completa de primera especie:

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} \quad (6)$$

con argumento $k \equiv 2 \sinh \Theta / \cosh^2 \Theta$.

La ecuación (5) predice un valor de energía por unidad de espín de -2 para $T \rightarrow 0$, que se corresponde con el estado de todos los espines alineados. Esto es lo que cabe esperar, ya que sin temperatura, el sistema tiende al estado de mínima energía.

2.5. Calor específico

El calor específico es la energía requerida para aumentar la temperatura. En un sistema termodinámico se define como la derivada del promedio de la energía con respecto a la temperatura:

$$C \equiv \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \quad (7)$$

Sin embargo, resulta mucho más sencilla calcularlo a partir del Teorema de Fluctuación-Disipación:

$$\frac{C}{N} = \frac{(\Delta E)^2}{k_B T^2} \quad (8)$$

donde $(\Delta E)^2$ es la varianza de la energía, definida como $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$.

Alrededor de la temperatura crítica, se observa un pico en el calor específico, debido que la transición de fase es de segundo orden. Al haber un máximo en T_c , la derivada de C es nula en ese punto, y por tanto,

$$\left. \frac{\partial^2 \langle E \rangle}{\partial T^2} \right|_{T_c} = 0 \quad (9)$$

La curva matemática que describe el calor específico por unidad de espín como función de la temperatura vendrá dada por la derivada de (5) con respecto a la temperatura.

Sin embargo, ya que la curva resultante tiene una expresión muy complicada, se intentará ajustar de forma más sencilla con una lorentizana:

$$L(T) = \frac{A}{\sqrt{(T_0^2 - T^2)^2 + (2bT)^2}} \quad (10)$$

donde A , T_0 y b son parámetros a ajustar. Esta curva exhibe un máximo pronunciado en $T_{max} = \sqrt{T_0^2 - 2b^2}$, y tiende a 0 para $T \rightarrow \infty$. Dado que el calor específico debe tender a 0 para $T \rightarrow 0$, reflejaremos la curva respecto a su máximo, evaluándola en $T \mapsto T_{max} - (T - T_{max}) = 2T_{max} - T$, de manera que el calor específico se aproxima por:

$$\frac{C(T)}{N} \approx \frac{A}{\sqrt{(T_0^2 - (2T_{max} - T)^2)^2 + (2b(2T_{max} - T))^2}} \quad (11)$$

Para sistemas de tamaño infinito, el calor específico en su valor máximo diverge. Concretamente, la relación entre el pico de calor específico y la longitud sigue la relación lineal siguiente:

$$\frac{C_{max}}{N} \sim \log L \quad (12)$$

que predice una divergencia de tipo logarítmico para $L \rightarrow \infty$.

2.6. Campo externo: susceptibilidad

La susceptibilidad de un material se define como la variación de la magnetización con respecto a un campo magnético externo:

$$\chi \equiv \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial H} \quad (13)$$

pero se puede obtener mediante el teorema de fluctuación-disipación incluso para campos magnéticos externos nulos, de manera que:

$$\frac{\chi}{N} = \frac{(\Delta M)^2}{k_B T} \quad (14)$$

De manera similar a la capacidad calorífica, esta cantidad diverge en la temperatura crítica en el caso de $L \rightarrow \infty$, pero para un tamaño de red finito, sigue la siguiente relación de potencias:

$$\chi_{max} \sim L^{\gamma/\nu} \quad (15)$$

donde los exponentes críticos valen $\gamma = 7/4$ y $\nu = 1$.

2.7. Entropía

La entropía se puede expresar en la teoría de sólidos, cuando el calor específico es función de la temperatura, de la siguiente manera:

$$S(T) = \int_{T_0}^T \frac{C(T')}{T'} dT' \quad (16)$$

Por tanto, se puede hallar en el modelo de Ising integrando el calor específico. Para facilitar la integración a los puntos obtenidos numéricamente, se puede emplear una función de ajuste como ayuda, por ejemplo, la lorentziana dada por (11).

3. Métodos numéricos

3.1. Algoritmo de Metrópolis

Para hacer evolucionar el sistema teniendo en cuenta la interacción de los espines con la temperatura a la que está el sistema, se usará un método de Monte Carlo: el algoritmo de Metrópolis, basado en la Mecánica Estadística.

Se toma un cierto espín de la red s_i y se gira su orientación. Dado que la naturaleza tiende a los mínimos de energía, se calcula la energía del sistema, y si la nueva energía es menor, es decir, $\Delta E = E_{propuesta} - E_{actual} < 0$, el cambio se acepta automáticamente.

Lo natural sería que cambios a mayor energía no se aceptaran, pero el baño térmico proporciona energía al sistema de manera que algunos espines pueden invertirse de manera espontánea, aunque lleven a una energía global mayor.

La probabilidad de que un espín se invierta en función de la temperatura está dada por el factor de Boltzmann:

$$P(T) = e^{-\Delta E/k_B T} \quad (17)$$

También cabe destacar que no es necesario calcular la energía de todo el sistema usando la expresión (1), ya que al realizarse un cambio local, la variación de energía se puede obtener exactamente como:

$$\Delta E = 2Js_{ij}(s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1}) \quad (18)$$

en el caso con $H = 0$. Si $H \neq 0$, entonces aparece un término adicional de la forma $2\mu H s_{i,j}$

Esto reduce el tiempo de cálculo de $O(n^2)$ a $O(1)$, ya que pasa a no requerir ningún bucle.

Por último, existen dos métodos para elegir el espín a invertir. Por un lado, se puede escoger cada vez un espín aleatorio de la red, que sería el caso que sucede en la naturaleza, pero tarda más tiempo en converger a un resultado específico. Si se emplea este método, se considera que el sistema ha dado un paso de Monte Carlo, es decir, que ha evolucionado, cuando se considera la inversión de N espines, es decir, que en promedio se habrá intentado cada vez uno.

La otra opción es escoger espines sistemáticamente, es decir, escogerlos en orden de posición. En este caso se considera un paso de Monte Carlo cuando se hayan recorrido los N espines de la red.

3.2. Generación de redes

Para cada temperatura T y longitud de la red L , se comenzará con un estado inicial en el que toda la red está ordenada, con todos sus espines apuntando hacia arriba ($s_{i,j} = 1$).

Se realizan pasos de Monte Carlo dependiendo de la cercanía con la temperatura crítica. Para puntos cerca de T_c , el sistema es muy inestable debido a las intensas fluctuaciones, por lo que se requiere un número de pasos mayor para obtener resultados realistas.

Por ello se emplea un número de pasos dado por una distribución gaussiana:

$$n_{pasos}(T) = n_0 + n_{max}e^{-(\frac{T-T_c}{\sigma})^2} \quad (19)$$

y se han usado los valores $n_0 = 250$ para el número mínimo de pasos, $n_{max} = 2000$ para el número máximo de pasos adicionales, T_c dada por la expresión (2), y $\sigma = 0,4 J/k_B$ para la desviación típica.

Dado que la región cercana a T_c exhibe el comportamiento más interesante, se generarán más redes con temperaturas en esta región, también usando una distribución gaussiana. El 20% de los valores de temperatura restante consiste en puntos uniformemente distribuidos en el rango de temperaturas estudiado.

4. Resultados

4.1. Magnetización y energía

Se toma una red de $L = 20$ espines por lado, y se hace evolucionar siguiendo el proceso detallado en 3. Estudiaremos la magnetización y la energía del sistema obtenidas.

Dado que el sistema es particularmente inestable en las regiones con $T \sim T_c$, representaremos sus promedios a todos los microestados recorridos, es decir, a todos los pasos de Monte Carlo realizados.

En la figura (1) se muestran la magnetización y energía promedio por unidad de espín.

Se observa que se ha logrado con éxito recrear la transición de fase de la magnetización, ya que esta cae bruscamente para un valor de temperatura de $T \approx 2,25$. Sin embargo, se observa que hay un remanente de puntos de temperaturas mayores que no muestran magnetización nula. Esto se debe a las intensas fluctuaciones del sistema en la región crítica, que requieren muchos más pasos de Monte Carlo para ser contrarrestadas.

Además, observamos que entre los ajustes a las magnetizaciones predichas por la teoría del campo medio (3), y la solución analítica de Onsager para una red infinita, (4), la mejor coincidencia se da con la curva de Onsager, que ajusta con gran precisión la mayoría de los puntos para $T < T_c$.

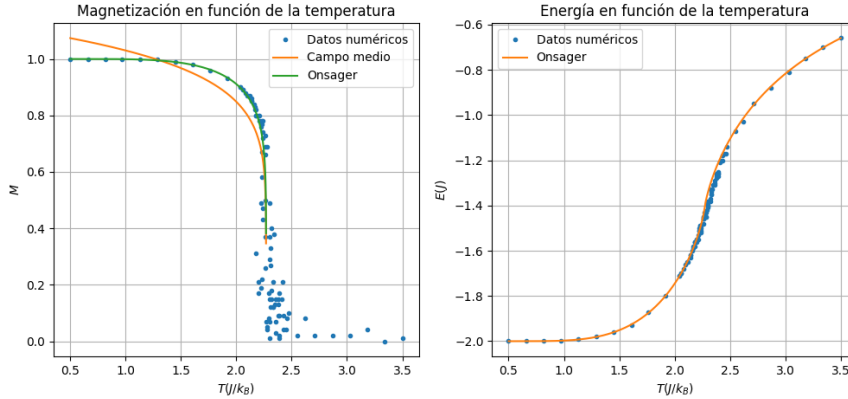


Figura 1: Magnetización y energía promedio por unidad de espín en el Modelo de Ising 2D con una red de 20×20 espines, representado para $T \in [0,5, 3,5]$.

Ambos ajustes a la magnetización devuelven los parámetros esperados para la temperatura crítica, con un valor de $T_c = 2,269$, y para el exponente crítico, con $\beta = 0,125 = 1/8$. Sin embargo, como se ha comentado, el mejor

ajuste a la magnetización es el analítico.

Por otro lado, estudiamos la energía promedio del mismo sistema, y observamos que los valores siguen un patrón mucho más claro, sin tanto ruido en la región crítica. Comparando los datos con la curva analítica para una red infinita (5), se observa una correspondencia muy cercana.

4.2. Calor específico

Pasamos a estudiar el calor específico del sistema, calculado con el teorema de fluctuación-disipación (8), y representado en la figura (2).

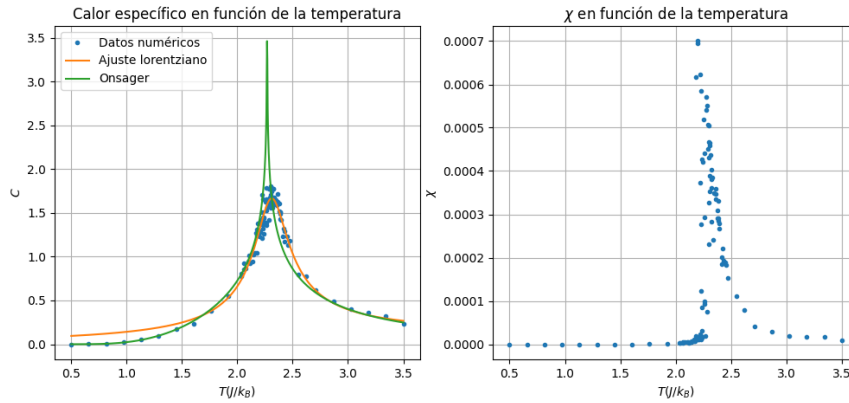


Figura 2: Calor específico por unidad de espín y susceptibilidad por unidad de espín en el modelo de Ising bidimensional con $L = 20$, representado para $T \in [0,5, 3,5]$.

La gráfica exhibe un máximo en una región situada en una temperatura mayor a la temperatura predicha por la solución analítica. Esto se debe a los efectos de tamaño finito, ya que la predicción de la solución para una red infinita es que el calor específico diverge logarítmicamente en la temperatura crítica, como se ve en la curva analítica.

Sin embargo, se puede ajustar el comportamiento del calor específico a una curva lorentziana, dada por (11). Con este ajuste podemos predecir el máximo aproximado de la distribución, eliminando el ruido producido por las fluctuaciones.

Del ajuste a la curva anterior, se recuperan los parámetros $A = 1,108$, $T_0 = 2,321$, y $b = 0,144$. Por tanto la temperatura a la que sucede el máximo de acuerdo con el ajuste es de $T_{max} = 2,312$, mayor a T_c , como se observa en la gráfica.

También se observa en la figura (2) la susceptibilidad en función de la temperatura. Se verifica el comportamiento de la teoría: susceptibilidad nula para $T < T_c$, un pico para $T \sim T_c$, correspondiente a una divergencia que aparece en el caso de tamaño infinito, y una caída hacia 0 para $T > T_c$ siguiendo una ley de potencias.

4.3. Entropía

Calculando la entropía del sistema usando la ecuación (16), se obtienen los resultados vistos en la figura (3).

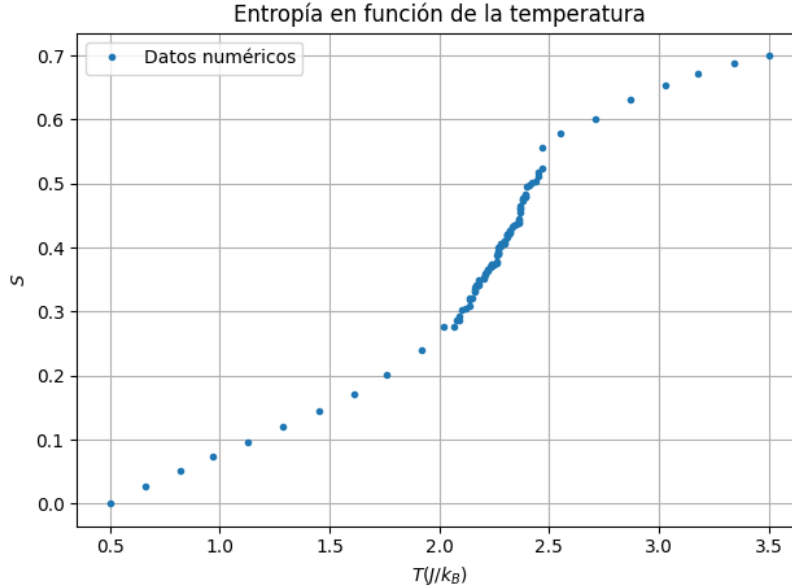


Figura 3: Entropía del modelo de Ising en función de la temperatura para $L = 20$.

Como es predecible, la entropía aumenta con la temperatura, ya que los espines están cada vez más desordenados a medida que la temperatura aumenta, observándose un gran incremento de la entropía en la fase crítica. Esto se ajusta con la predicción teórica, ya que la entropía está relacionada íntimamente con la energía, que exhibe un comportamiento similar.

4.4. Teoría de escalado de tamaño finito

Ahora estudiaremos múltiples redes de espines con distintos lados, $L \in [5, 40]$. Se calculará el calor específico como en el caso anterior y se observará su valor máximo para cada tamaño de red L , con ayuda del ajuste lorentziano.

Relacionando el valor C_{max}/N con el logaritmo del tamaño $\log L$, se debe recuperar la relación teórica (12). Observamos en la figura (4) que aparece una relación lineal entre ambas magnitudes, como predice la teoría, de manera que el calor específico diverge logarítmicamente para $L \rightarrow \infty$.

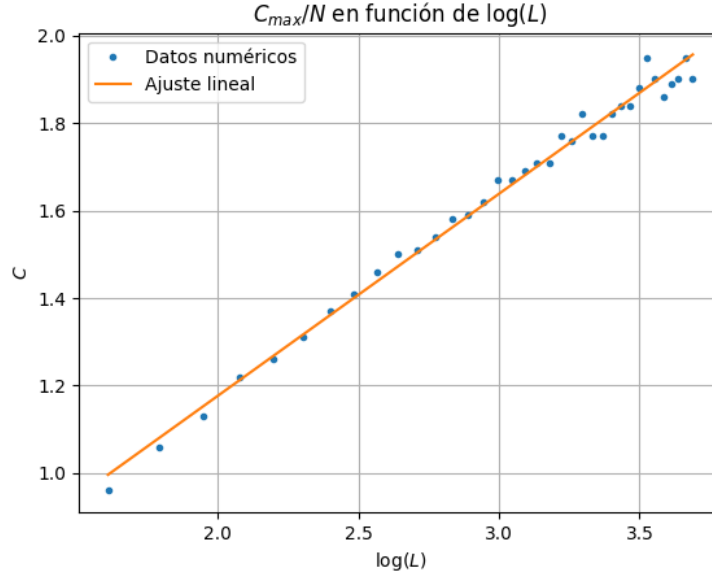


Figura 4: Máximo del calor específico por unidad de espín frente a logaritmo del lado de la red L , con $L \in [5, 40]$.

Los valores del ajuste lineal son $m = 0,462$ para la pendiente y $n = 0,253$ para la ordenada en el origen.

Similarmente, también se puede estudiar el comportamiento de la susceptibilidad con el tamaño del sistema, dado por la ecuación (15), o en forma logarítmica:

$$\log(\chi_{max}) \sim \frac{\gamma}{\nu} \log L \quad (20)$$

Los resultados se representan en la figura (5). Se observa que se verifica una relación lineal de pendiente $m = -2,93$ y ordenada $n = -0,11$.

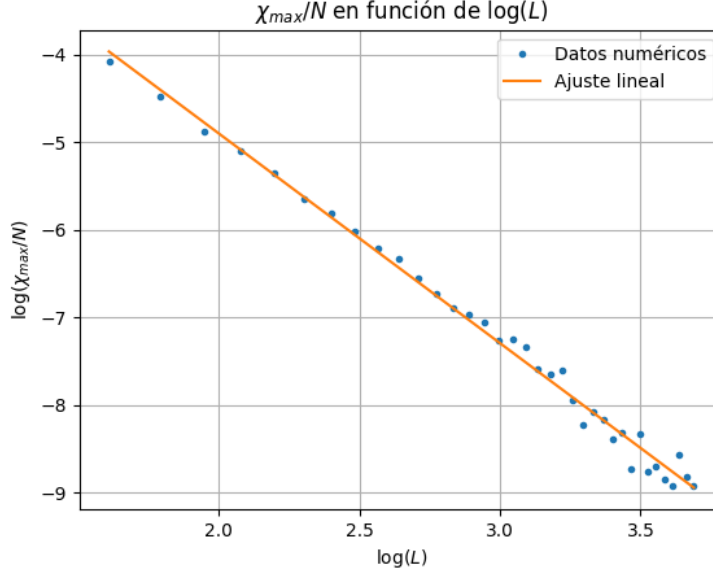


Figura 5: Susceptibilidad máxima para diferentes tamaños de red $L \in [5, 40]$.

5. Conclusión

A través de las simulaciones realizadas, se ha demostrado que el modelo de Ising en dos dimensiones reproduce con notable precisión la transición de fase ferromagnética. La implementación del algoritmo de Metropolis ha permitido observar el comportamiento de diversas magnitudes termodinámicas, en particular la caída de la magnetización cerca de la temperatura crítica, el aumento brusco del calor específico y la divergencia de la susceptibilidad en redes grandes.

Los resultados numéricos concuerdan en gran medida con las soluciones analíticas conocidas, especialmente la solución de Onsager para una red infinita. Sin embargo, también se han puesto de manifiesto las limitaciones asociadas al tamaño finito de las redes, observándose desplazamientos en los máximos y fluctuaciones más pronunciadas en la región crítica. El análisis de escalado ha sido clave para cuantificar estos efectos y reforzar la comprensión del comportamiento colectivo en sistemas finitos.

En conjunto, este estudio confirma el valor del modelo de Ising no solo como una herramienta teórica, sino también como un sistema ideal para la implementación de técnicas numéricas aplicadas a la física estadística.

Referencias

- [1] Giordano, Nakanishi. *Computational Physics*. Addison Wesley, 2006.
- [2] L. Onsager. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3–4):117–149, 1944.