

1. Apartado A

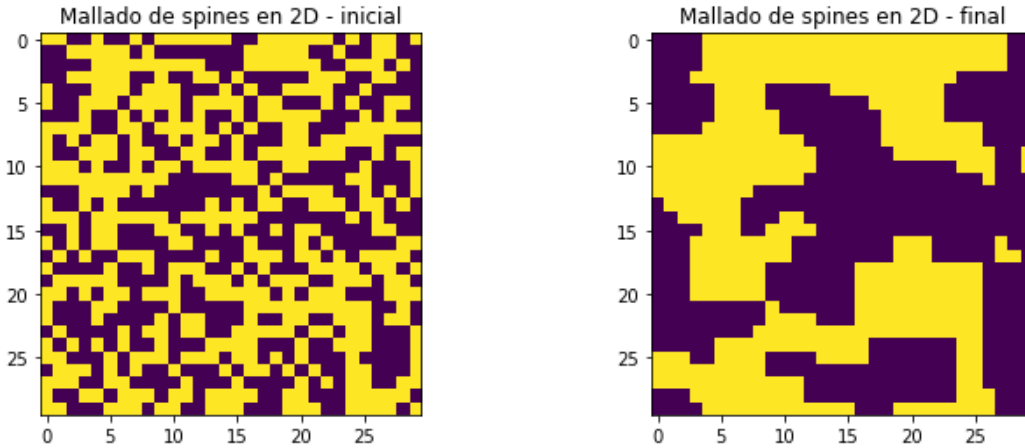
En esta práctica de ordenador nos hemos centrado en el desarrollo de un programa que implemente el modelo de Ising en una red bidimensional de espines que únicamente pueden tomar los valores $s = -1$ y $s = 1$. Dichos valores se determinan de forma aleatoria y serán almacenados en una matriz cuadrada de dimensiones $N \times N$.

Para este problema únicamente tenemos en cuenta la interacción entre primeros vecinos e impondremos unas condiciones de contorno periódicas de forma que consideremos que las partículas situadas en la primera y última columna interaccionan. Esto lo obtenemos tomando como índice de posición de la partícula el módulo de i/N , donde i es el índice en la matriz. Procedemos de igual forma para las filas.

La simulación comienza con la variación de forma aleatoria de uno de los espines de la red. Es entonces cuando, ayudados del Método Montecarlo, calcularemos la probabilidad de que el sistema cambie de estado o se mantenga. Estas probabilidades están relacionadas con la variación de energía entre estados, $\Delta E = E_{new} - E_{old}$. La probabilidad de encontrarse en cada una de estas energías, siendo $\beta = 1/kT$, es:

$$P_{new} = \frac{1}{1 + e^{\beta \Delta E}} \quad P_{old} = \frac{1}{1 + e^{-\beta \Delta E}}$$

Una vez calculadas estas probabilidades, que por depender de β dependen de T , decidiremos si el sistema cambia o no. Para nuestra simulación hemos tomado $N = 30$, $P(s = 1) = P(s = -1) = 1/2$ y $k = 1$. Dicho programa se incluye en el archivo *zip* de la entrega. Para temperatura baja ($T = 0.8$), la red de espines inicial y final queda:



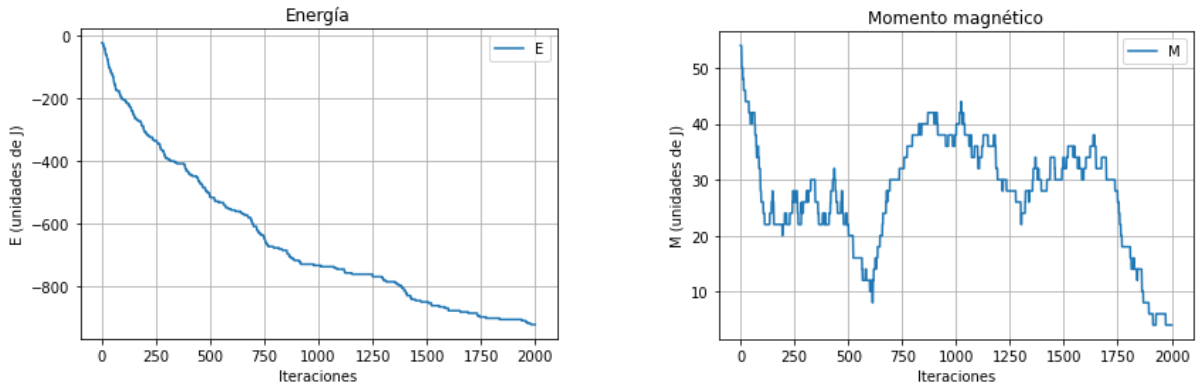
En estas figuras podemos ver como los spines han ido reagrupándose según su orientación, alcanzando de esta forma una posición de equilibrio.

2. Apartado B

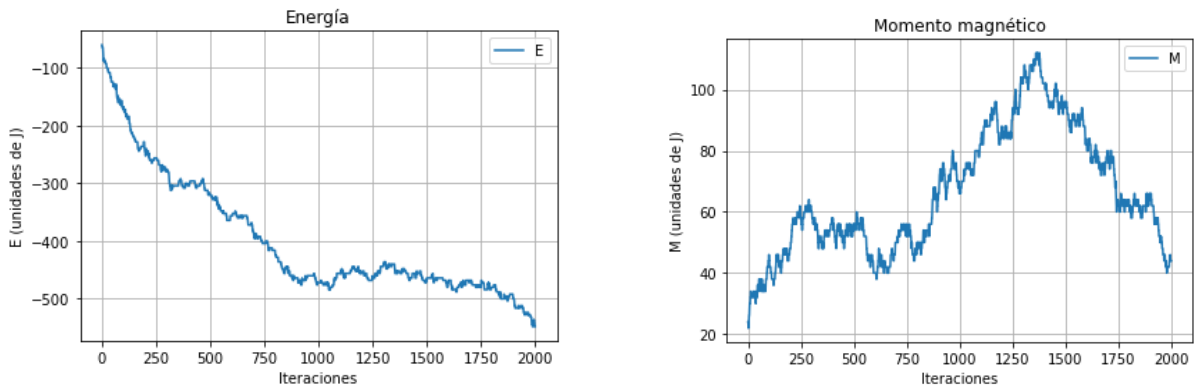
A continuación estudiaremos la evolución de la energía y la magnetización de la red con el cambio. Ambas magnitudes vienen dadas, respectivamente, por las siguientes ecuaciones:

$$E = -\frac{J}{2} \sum_{i,j}^k s_i s_j \quad M = \sum_i s_i$$

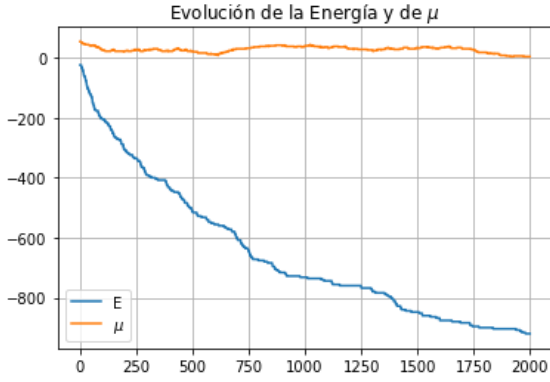
La suma en el caso de la energía se hace únicamente sobre pares vecinos. Si tomamos $J = 1$ como energía de interacción, $I = 2000$ iteraciones y $T = 0,8 \text{ K}$, obtenemos los siguientes resultados:



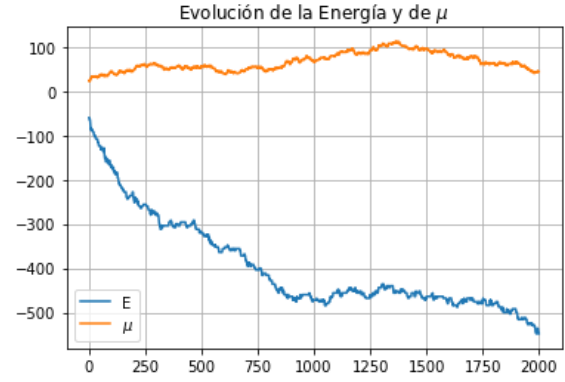
En cambio, si consideramos una temperatura mayor ($T = 3 \text{ K}$):



Para comparar mejor ambos casos tenemos las siguientes gráficas:



(a) $T = 0,8 \text{ K}$



(b) $T = 3 \text{ K}$

En el caso de la temperatura más baja vemos que la energía total desciende hasta su estado de equilibrio, y que la magnetización varía alrededor de un mismo valor.

Por otra parte, en el caso de la temperatura más alta vemos que la energía y la magnetización a grandes rasgos se comportan de forma similar al caso anterior, sin embargo, vemos que no alcanza la posición de equilibrio tan fácilmente, y que aparecen muchas más fluctuaciones alrededor del equilibrio que cuando la temperatura es más baja.

Adicionalmente hemos realizado una animación de la red de spines en colores para seguir la simulación. Esta animación se obtiene al ejecutar el código adjunto en el archivo zip, donde se puede ver como va evolucionando la simulación.

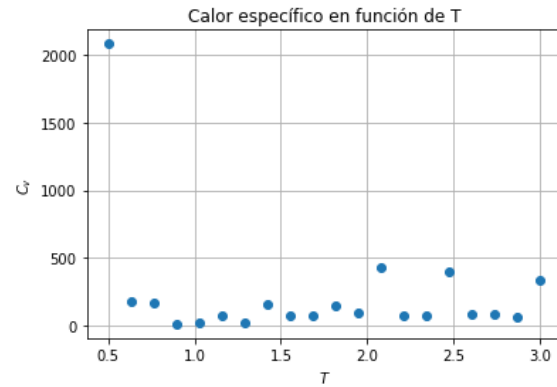
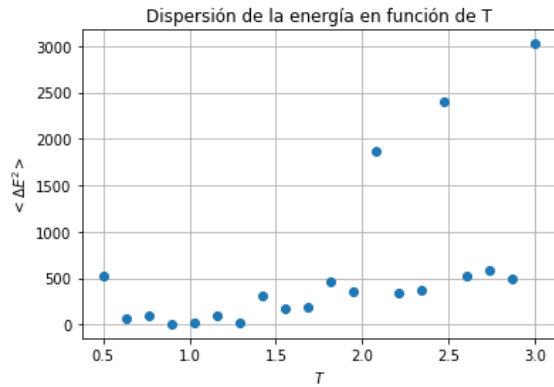
3. Apartado C

Por último, vamos a estudiar la relación entre el calor específico C_v y la dispersión de la energía. A nivel teórico tenemos las siguientes expresiones:

$$\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad c_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \Big|_V = \frac{\langle \Delta E^2 \rangle}{kT^2}$$

Al representar estas ecuaciones obtenemos las gráficas que presentamos a continuación:

Al fijarnos en la primera figura, vemos que la dispersión de la energía a temperaturas bajas la dispersión de energía es pequeña ya que el sistema se encuentra en la posición de equilibrio por lo que los spines no tienden a cambiar, sin embargo, a medida que aumenta vemos que



se producen ciertas discontinuidades, las cuales pueden deberse a la transición de fase entre estados estacionarios ya que los spines tienen más probabilidad de no permanecer en dicha posición de equilibrio.