

donde  $\bar{x} = \alpha a^{k+1} + (1 - \alpha) b^{k+1}$ , lo que es una contradicción dado que  $L(a^{k+1}, \mu^k, \lambda_k)$  es valor óptimo. Por tanto,  $y_i^{1,k+1} = y_i^{2,k+1}$  para cada  $i = 1, \dots, m$ , de lo que se deduce que es único. Luego también  $\mu_i^{k+1}$  será único.

Si  $y_i^{1,k+1} = y_i^{2,k+1}$  para cada  $i = 1, \dots, m$ ,  $y_i^{k+1}$  es único. Luego también  $\mu_i^{k+1}$  será único.

## Bibliografía

1. Bertsekas, D. P., Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Method, Academic Press, New York, 1982.
2. Gonzaga, C. y Castillo, R., "Métodos de Lagrangeano Aumentado usando Penalidades Generalizadas para Programação não linear" Tesis, COPPE, UFRJ, 1998.
3. Hiriart - Urruty J.- Baptiste y Lemaréchal, C., Convex Analysis and Minimization Algorithms I, 1 ed. New York, Springer-Verlag, 1993.
4. Hiriart - Urruty J.- Baptiste y Lemaréchal, C., Convex Analysis and Minimization Algorithms II, 1 ed. New York, Springer-Verlag, 1993.
5. Hestenes, M., "Multiplier and Gradient Methods", Jota, vol 4, pp. 303-320, 1969.
6. Iusem, A., Métodos de Ponto Proximal em Otimizacão, 20º Coloquio Brasileiro de Matemática, IMPA, R., J., Brasil, 1995.
7. Martinet, B., "Regularisation D'inequations variationnelle par approximations successives", Revue Francaise de Informatique et Recherche Opérationnelle 2, pp. 154 - 159, 1970.
8. Powell, M., "A method for nonlinear constraints in minimizations problems", Ed., Academic Press, N.Y., pp. 283-298, 1969.
9. Rezza, Y., "Una prueba general de la buena definición del Método Lagrangeano Aumentado", Revciuni, vol. 7, num. 1, pp. 38-57, 2003.
10. Rockafellar R. T., "Augmented Lagrangians and applications of the proximal point algorithm in convex programming", Mathematics of Operations Research, vol. 1, pp. 97-116, 1976.

# MÉTODO MONTECARLO– METRÓPOLIS EN LA SOLUCIÓN DEL MODELO DE ISING PARA EL FERROMAGNETISMO

Angel Paredes \*, Héctor Loro \*\*

## RESUMEN

Se usa el método Montecarlo-Metrópolis para describir y analizar el comportamiento de un magneto Ising bidimensional partiendo de diferentes configuraciones.

Se comprueba que debajo de la temperatura crítica del magneto,  $T_c \approx 2,3 \text{ J}/k_B$ , el sistema se mantiene "ordenado" y por encima de esta temperatura, el magneto se "desordena". Cuando se desciende la temperatura se encuentra la presencia de dominios. El tamaño de estos dominios depende de lo rápido que desciende la temperatura.

\* ajparedes@uni.edu.pe.

\*\* hloro@uni.edu.pe

Facultad de Ciencias. Universidad Nacional de Ingeniería. Lima -Perú

**ABSTRACT**

The Montecarlo-Metropolis method is used to describe and analyze the behavior of a bidimensional Ising magneto beginning with different configurations. It is found that below the magnet critical temperature,  $T_c \approx 2,3 J/ k_B$  the system stays "ordered", and over this temperature the magnet stays "disordered". When the temperature is going down, the presence of domains is found. The size of these domains depends on the rate at which the temperature is decreased.

**Introducción**

En muchos metales ordinarios como el hierro o el níquel se presenta una magnetización espontánea llamada ferromagnetismo. Esta magnetización aparece inclusive cuando no hay un campo magnético externo y se debe a que una fracción importante de los momentos magnéticos, o espines, de los átomos se alinean en la misma dirección debido a la interacción entre los mismos, dando lugar a que la muestra se imane.

Este alineamiento se produce únicamente a temperaturas bajas, por debajo de una temperatura característica llamada temperatura crítica,  $T_c$ . Por encima de dicha temperatura los espines están orientados al azar, de forma que no hay un campo magnético neto. En la temperatura crítica, como en toda transición, aparece una fenomenología diferente: por ejemplo, el calor específico es divergente, y la energía y la magnetización tienen derivada discontinua.

**MODELO DE ISING**

El modelo de Ising es un modelo sencillo para el estudio de un arreglo de espines localizados considerando las siguientes simplificaciones [1] :

- (1) El estado de cualquier espin es descrito por un número  $s_i$  que puede tomar los valores +1 ó -1. Es  $s_i = +1$  si el spin se orienta en la dirección +Z y  $s_i = -1$  si el spin se orienta en la dirección -Z. En lo anterior se considera que el campo magnético externo está orientado en la dirección +Z.

- (2) Los espines están ubicados en los nudos de una red cúbica simple (modelo de Ising tridimensional o modelo 3D). En el modelo 2D (Figura 1) los espines están en el plano en un arreglo cuadrado y en el modelo 1D ellos están en intervalos igualmente espaciados en una línea.
- (3) La energía de interacción entre espines tiende a alinearlos. Para cada par de espines vecinos más cercanos, si estos son paralelos contribuyen con  $-J$  a la energía total del sistema, y si son antiparalelos con  $+J$ , donde  $J$  es la constante de acoplamiento por intercambio. En presencia de un campo magnético externo,  $H$ , el Hamiltoniano del sistema en una configuración particular  $S$ , es [2].

$$\mathfrak{K} = - \sum_{\alpha=1}^N H \mu s_{\alpha} - J \sum'_{\alpha\sigma} s_{\alpha} s_{\sigma} \quad (1)$$

$J$  representa la energía de interacción entre los espines y depende del material que se estudia. La suma primada indica que la sumatoria es solo sobre pares de espines vecinos más cercanos.

Al arreglo de espines con estas simplificaciones se le denomina magneto de Ising.

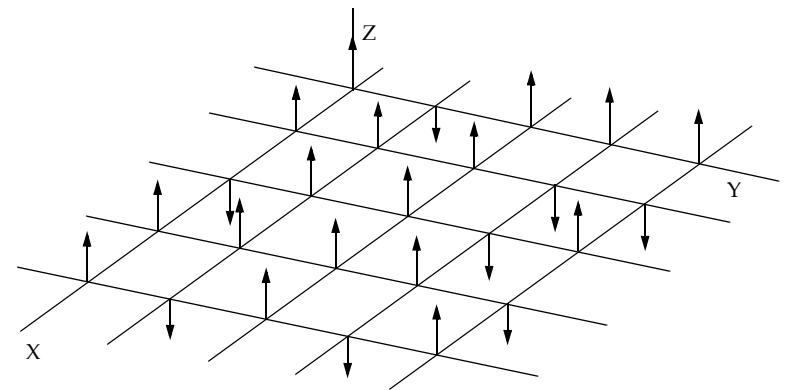


Figura 1. Modelo de Ising bidimensional

## ENERGÍA INTERNA, CAPACIDAD CALORÍFICA Y MAGNETIZACIÓN DE UN MAGNETO DE ISING BIDIMENSIONAL

En el estudio de un magneto de Ising bidimensional se considera que los espines están colocados sobre los nudos de una red de  $N_x \times N_y$  espines localizados en el plano. Nombramos cada espin como  $s_{ij}$ , donde  $ij$  son los índices para las dos direcciones espaciales.  $s_{ij}$  pueden tomar los valores +1 (“arriba”) ó -1 (“abajo”). El hamiltoniano del sistema es (1).

El espin en el nudo  $ij$  interactúa solo con los espines  $(i \pm 1, j)$  e  $(i, j \pm 1)$ . Asumimos condiciones de contorno periódicas en la red, es decir que el vecino  $s_{N_x+1, j}$  del espin  $s_{N_x, j}$  es idéntico a  $s_{1, j}$ , y el vecino  $s_{i, N_y+1}$  del espin  $s_{i, N_y}$  es idéntico a  $s_{i, 1}$ ; la red tiene por tanto la topología de un toroide. Considerando un espin con sus vecinos mas cercanos y  $J$  positivo, la energía más baja de este arreglo se obtiene cuando el espin tiene la misma dirección que sus vecinos (ferromagnetismo), mientras que cuando  $J$  es negativo, la energía más baja se obtiene cuando el espin es antiparalelo a sus vecinos (antiferromagnetismo). El campo magnético externo fija la dirección de alineamiento de los espines.

Estamos interesados en la termodinámica de este sistema. Las configuraciones del sistema son especificadas dando los valores de todas las  $N_x \times N_y \equiv N$  variables de espin. La probabilidad de que ocurra la configuración  $S$  de las  $2^N$  posibles a la temperatura  $T$ , en el ensemble canónico, es:

$$P(S) = \frac{e^{-\beta E(S)}}{Q} \quad , \quad (2)$$

donde la función de partición del sistema es

$$Q(\beta, N, H) = \sum_S e^{-\beta E(S)} \quad ; \quad (3)$$

$\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $T$  la temperatura y  $E(S)$  es el valor propio del hamiltoniano (1) para la configuración  $S$ .

Las cantidades termodinámicas en que estamos interesados son la magnetización  $M$ :

$$M = \langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Q}{\partial H} = \sum_S P(S) \left( \sum_{\alpha} \mu s_{\alpha} \right) \quad , \quad (4)$$

la energía interna promedio  $E$ :

$$E = \langle E \rangle = \sum_S P(S) E(S) \quad , \quad (5)$$

y el calor específico

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\beta}{T} \left[ \sum_S P(S) E^2(S) - E^2 \right] \quad , \quad (6)$$

Para una red infinitamente grande, ( $N_{x,y} \rightarrow \infty$ ), se puede resolver el modelo de Ising exactamente [3], [4]. Las expresiones se simplifican cuando  $H = 0$ . En este límite, la energía esta dada por

$$E = -NK(\coth 2K) \left[ 1 + \frac{2}{\pi} \kappa' K_1(\kappa) \right] \quad , \quad (7)$$

con  $K = \frac{J}{k_B T}$  y  $\kappa' = 2 \tanh^2 2K - 1$ . Además  $K_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{(1 - \kappa^2 \sin^2 \theta)^{1/2}}$

es la integral elíptica de primera clase donde  $\kappa = 2 \frac{\sinh 2K}{\cosh^2 2K} \leq 1$

El calor específico es

$$C_V = N \frac{2}{\pi} (K \coth 2K)^2 \left( 2K_1(\kappa) - 2E_1(\kappa) - (1 - \kappa') \left[ \frac{\pi}{2} + \kappa' K_1(\kappa) \right] \right) \quad (8)$$

donde  $E_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} d\phi (1 - \kappa^2 \sin^2 \phi)^{1/2}$  es la integral elíptica de segunda clase.

La magnetización esta dada por

$$M = \begin{cases} 0 & T > T_C \\ \pm N \frac{(1+z^2)^{1/4} (1-6z^2+z^4)^{1/8}}{(1-z^2)} & T < T_C \end{cases}$$

donde  $z = e^{-2K}$ . Además  $K_C \approx 0.44069$  es el valor de  $K$  para el cual  $\kappa = 1$  en el que  $K_1$  tiene una singularidad logarítmica entonces la temperatura crítica es  $T_C = J/(k_B K_C) = 2.269 J/k_B$ .

Luego, todas las funciones termodinámicas tienen un comportamiento “especial” a esta temperatura, sugiriendo fuertemente una transición de fase. Esto es confirmado por el comportamiento de la magnetización, que se anula por encima de la temperatura crítica  $T_C$  y puede tomar uno de los dos valores iguales y opuestos debajo de esta temperatura.

### TRAYECTORIAS DE UN SISTEMA EN EL ESPACIO DE CONFIGURACIONES

Una trayectoria es una secuencia cronológica de configuraciones para un sistema. Por ejemplo, las configuraciones de un magneto de Ising es la lista de variables espin  $s_1, s_2, s_3, \dots, s_N$ . Sea  $S = (s_1, s_2, s_3, \dots, s_N)$  una abreviación para un punto en este espacio de configuraciones  $N$ -dimensional. Ahora imaginemos una curva a través de este espacio. Sea  $S(\tau)$  la lista  $s_1, s_2, s_3, \dots, s_N$  en el paso  $\tau$ -ésimo en esta curva. La función  $S(\tau)$  es entonces una trayectoria. Esquemáticamente se representa en la Figura 2 los seis pasos de una trayectoria. Las letras a, b, c y d se refieren a diferentes configuraciones. Por ejemplo, a = (1,1,-1,1,...) ; b = (1,-1,-1,1,...) ; c = (-1,-1,-1,1,...) y d = (1,-1,1,-1,...).

Configuraciones

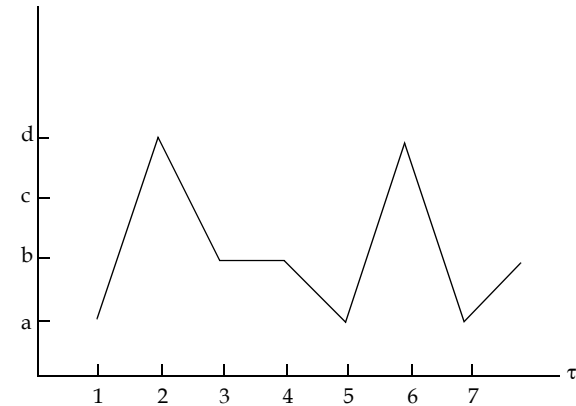


Figura 2. Trayectoria de un magneto Ising

Las propiedades de un sistema cambian en una trayectoria y el promedio de una propiedad  $G_s = G(s_1, s_2, s_3, \dots, s_N)$  sobre las configuraciones visitadas durante una trayectoria con  $L$  pasos es

$$\langle G \rangle_L = \frac{1}{L} \sum_{t=1}^L G_{S(\tau)} \quad (10)$$

Si  $L \rightarrow \infty$

$$\langle G \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle G \rangle_L \quad (11)$$

Se comprueba que  $\langle G \rangle$  es el valor medio de  $G$  para el equilibrio térmico, independientemente de la trayectoria seguida. Esto se debe a que las frecuencias relativas con la cual las diferentes configuraciones son visitadas se construyen siguiendo la ley de distribución de Boltzmann. En la práctica las trayectorias se siguen solamente para un tiempo de duración finito, y el promedio sobre configuraciones proveerá sólo un estimado de  $\langle G \rangle$ .

## TRAYECTORIA MONTECARLO

Ahora consideremos una regla o algoritmo para realizar una trayectoria. El esquema corresponde a la ejecución de un camino aleatorio a través del espacio de configuraciones. Los resultados obtenidos al evaluar promedios sobre estas trayectorias corresponden a los promedios esperados para el ensemble en equilibrio.

Los métodos Montecarlo en computación numérica son técnicas estadísticas (o probabilísticas) para resolver problemas ya sean determinísticos (por ejemplo, evaluación de una integral definida multidimensional) o sean probabilísticos (por ejemplo, absorción de neutrones por la materia) con la ayuda de números al azar. Para esto se toma una muestra representativa de estados o configuraciones en el cual la frecuencia relativa de visitas es consistente con la distribución del ensemble en equilibrio.

En el caso de un modelo de magneto de Ising de  $20 \times 20$  espines, hay  $2^{400}$  configuraciones posibles, de los cuales la mayoría tiene energías muy altas y su probabilidad es muy pequeña en la distribución de Boltzmann y no necesitan ser muestreados. Este último procedimiento se llama “de importancia” [5].

En Mecánica Estadística Clásica el promedio de una magnitud  $f(\epsilon)$  se define como [6]:

$$\langle f \rangle = \int f(\epsilon) w(\epsilon) d\epsilon, \quad (12)$$

donde  $\epsilon$  es la energía que depende de muchas variables y  $w(\epsilon)$  la densidad de probabilidad que es proporcional al factor Boltzmann

$$w(\epsilon) = \frac{1}{Q} \rho(\epsilon) \exp(-\epsilon/kT), \quad (13)$$

donde  $\rho(\epsilon)$  es la densidad de estados y

$$Q = \int \rho(\epsilon) \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon,$$

es la función de partición.

Como vemos el método Montecarlo “de importancia” es aparente para el promedio de magnitudes termodinámicas. El problema es que la función de partición  $Q$  es difícil de evaluar, por lo que se emplean métodos Montecarlo como el de Metrópolis que usa cocientes de densidad de probabilidad eliminando el factor  $Q$ .

## MÉTODO DE METRÓPOLIS

Apareció en 1953 cuando Metrópolis y sus alumnos intentaron mejorar el cálculo Montecarlo para la simulación de la transmisión de neutrones a través de la materia.

Supongamos que queremos generar un conjunto de “puntos” en un espacio multidimensional de variables  $x_\mu$  que representamos por  $\bar{X}$ . Sea  $P(\bar{X}_i)$  la probabilidad de obtener un punto  $\bar{X}_i$  particular. En el método Montecarlo - Metrópolis se genera una secuencia de puntos (camino aleatorio) siguiendo las siguientes reglas:

1. Dado el punto  $\bar{X}_n$ , para generar el punto siguiente  $\bar{X}_{n+1}$  se toma primero un paso al punto  $\bar{X}_t$ . Se considera que los puntos son uniformemente aleatorios (igual probabilidad) alrededor de un cubo multidimensional de pequeño lado  $\delta$  alrededor de  $\bar{X}_n$ , es decir los  $\bar{X}_t$  en el cubo son igualmente probables de ser elegidos.
2. El punto de prueba  $\bar{X}_t$  será  $\bar{X}_{n+1}$  (es aceptado) si

$$\eta = \frac{P(\bar{X}_t)}{P(\bar{X}_n)} > 1 \quad (14)$$

3. Si  $\eta < 1$  el paso es aceptado sólo si  $\eta > x$  donde  $x$  es un número aleatorio distribuido en  $[0,1]$ , de lo contrario se rechaza y  $\bar{X}_{n+1} = \bar{X}_n$ .
4. Generado  $\bar{X}_{n+1}$  se procede a generar  $\bar{X}_{n+2}$  por el mismo proceso haciendo un paso prueba a  $\bar{X}_{n+1}$ .

Cualquier punto arbitrario  $\bar{X}_0$  puede ser usado como punto de partida. Su influencia es menor cuanto mas larga es la secuencia de variables.

En Mecánica Estadística el método Montecarlo se utiliza para evaluar promedios en algún ensemble, usualmente el ensemble canónico.

En nuestro caso según la relación (2) el factor  $\eta$  en la ecuación (14) llega a ser:

$$\eta = \exp[-\beta(E(S_i) - E(S))] \quad (15)$$

Así pues el método Montecarlo-Metrópolis acepta un punto de prueba si su energía es menor que el punto anterior. Por el contrario si la energía aumenta se acepta esta posibilidad con una probabilidad  $\exp(-\Delta E/k_B T)$  donde  $\Delta E$  es el incremento de la energía y  $T$  la temperatura.

A continuación se detalla la aplicación del método Montecarlo-Metrópolis para un magneto de Ising.

Antes designemos por  $p$  el estado del sistema y por  $E_p$  su correspondiente nivel de energía. Entonces en el algoritmo Metrópolis, el paso a un nuevo estado  $q$  cuyo nivel de energía es  $E_q$  está gobernado por el factor  $\eta$  según

$$\eta = \exp(-\beta \Delta E_{pq}) , \quad (16)$$

donde  $\Delta E_{pq} = E_q - E_p$ .

Empezamos estableciendo nuestro sistema en una configuración inicial. Entonces escogemos de manera aleatoria uno de los espines en este conjunto. La elección aleatoria para el espin es ejecutada con la ayuda de un generador de números pseudo-aleatorios (un algoritmo que genera una larga secuencia de números aleatorios distribuidos uniformemente en el intervalo entre 0 y 1).

Habiendo escogido de una configuración  $p$  un espin de manera aleatoria, construimos una nueva configuración  $q$ , invirtiendo el espin elegido. Por ejemplo,  $p \rightarrow q$  podría corresponder a la situación representada en la (Fig. 3)

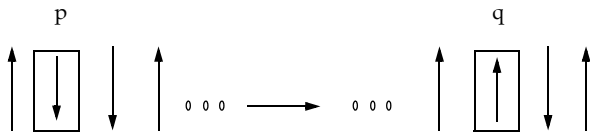


Figura 3. Inversión de un espin de la configuración  $p$ , elegido aleatoriamente

La modificación de la configuración cambia la energía del sistema en  $\Delta E_{pq} = E_q - E_p$ . Esta diferencia de energía gobierna la probabilidad relativa de ocurrencia de configuraciones a través de la distribución de Boltzmann y usando esta probabilidad construimos una trayectoria Montecarlo por un criterio de aceptación o rechazo de cambios a nuevas configuraciones.

Siguiendo las reglas dadas para el método Montecarlo-Metrópolis una trayectoria se genera como sigue: si el cambio de energía  $\Delta E_{pq}$  es negativa o cero, aceptamos el movimiento. Si  $\Delta E_{pq}$  es positiva, generamos un número aleatorio  $x$  entre 0 y 1, y aceptamos el movimiento solamente si tenemos  $\exp(-\beta \Delta E_{pq}) \geq x$ . De otra manera el movimiento a una nueva configuración en el próximo paso es rechazado. Así si en el paso  $\tau$  la configuración del sistema es

$$S(\tau) = p , \quad (17)$$

tenemos

$$S(\tau+1) = q \quad \text{cuando } \Delta E_{pq} \leq 0 , \quad (18)$$

$$y \quad S(\tau+1) = \begin{cases} q & \text{cuando } \Delta E_{pq} > 0 \text{ y } \exp(-\beta \Delta E_{pq}) \geq x \\ p & \text{cuando } \Delta E_{pq} > 0 \text{ y } \exp(-\beta \Delta E_{pq}) < x \end{cases} \quad (19)$$

Este paso repetimos un millón de veces formando así una gran trayectoria a través del espacio de configuraciones.

### SOLUCIÓN NUMÉRICA

En esta parte se encuentra una solución numérica del modelo de Ising 2D. Esta aplicación es útil como ilustración de las técnicas discutidas anteriormente. Además este modelo puede ser fácilmente generalizado a hamiltonianos mas complicados. Debido al gran número de términos envueltos, una evaluación directa de las sumas en las ecuaciones (4)-(6) está fuera de cuestión; aun para una modesta red de  $16 \times 16$  hay  $2^{256} \approx 10^{77}$

configuraciones diferentes. De aquí que, es más eficiente generar configuraciones  $S$  con probabilidad  $P(S)$  usando el algoritmo Metrópolis y entonces promediar los observables requeridos sobre estas configuraciones.

Consideremos las configuraciones  $S$  y  $S_t$  tales que son diferentes sólo por la inversión del espín  $s_\xi \equiv s_{ij}$ . Sean  $E_p$  y  $E_q$  las energías de las configuraciones  $S$  y  $S_t$  respectivamente. Entonces  $E_p$  viene dada por (1) y  $E_q$  se obtiene invirtiendo solo el espín  $s_\xi$ , es decir

$$E_q = -J \sum'_{\alpha\sigma} (s_\alpha) s_\sigma - \mu H \sum_{\alpha} (s_\alpha) \quad (20)$$

$\alpha = \xi : s_\xi \rightarrow -s_\xi$

en  $\sum'_{\alpha\sigma}$  para  $\alpha = \xi$ ,  $s_\xi$  cambió a  $-s_\xi$  con respecto a la configuración  $S$   
 $\alpha = \xi : s_\xi \rightarrow -s_\xi$

Al evaluar los productos  $s_\alpha \cdot s_\sigma$  se consideran solo los primeros vecinos. En la Figura 4 se muestra el espín  $s_\xi = s_{ij}$  y sus 4 vecinos más cercanos.

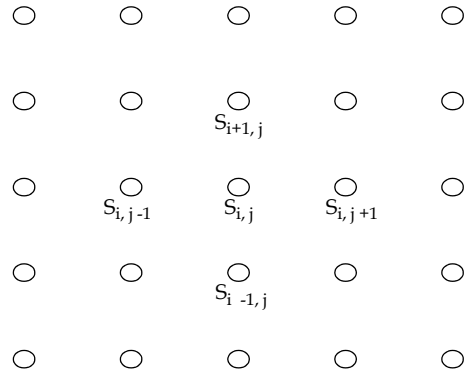


Figura 4. Un espín en la posición (i,j) y sus cuatro vecinos más cercanos

Luego la suma primada para la configuración  $S$  es:

$$\sum'_{\alpha\sigma} s_\alpha s_\sigma = \dots + s_{ij} s_{i-1,j} + s_{ij} s_{i+1,j} + s_{ij} s_{i,j-1} + s_{ij} s_{i,j+1} + \dots \quad (21)$$

Como para la configuración  $S_t$  se invirtió solo el spin  $s_{ij}$ , entonces la suma primada para  $S_t$  será idéntica a la suma primada para  $S$ , con excepción de los términos  $s_{ij} s_{i-1,j}$ ,  $s_{ij} s_{i+1,j}$ ,  $s_{ij} s_{i,j-1}$ ,  $s_{ij} s_{i,j+1}$ , que cambian a  $-s_{ij} s_{i-1,j}$ ,  $-s_{ij} s_{i+1,j}$ ,  $-s_{ij} s_{i,j-1}$ ,  $-s_{ij} s_{i,j+1}$ .

Por otra parte la suma no primada de  $E_q$ , en (20), coincide con la de  $E_p$ , en (1), excepto por el término cambiado de signo  $s_{ij}$ .

Tomando en cuenta las consideraciones anteriores restamos la ecuación (1) de (20), para obtener  $\Delta E_{pq}$ . Luego,

$$\Delta E_{pq} = 2J s_{ij} [s_{i-1,j} + s_{i+1,j} + s_{i,j-1} + s_{i,j+1}] + 2\mu H s_{ij} \quad (22)$$

De acuerdo al algoritmo Metrópolis se toma un espín al azar, se invierte, se calcula la diferencia de energía  $\Delta E_{pq}$  dado por (22) y se compara con un número aleatorio  $x$  (del procesador de la computadora). Ver Fig. 5. Como  $0 \leq x \leq 1$ , si  $\Delta E_{pq} \leq 0$  entonces  $\exp(-\beta \Delta E_{pq}) \geq 1 \geq x$  aceptamos ese movimiento; pero si  $\Delta E_{pq} > 0$  entonces cuando  $1 \geq \exp(-\beta \Delta E_{pq}) \geq x$  se acepta, de lo contrario se rechaza. Como sabemos teóricamente en  $T_C = 2,269 J/k_B$  hay una transición de fase. Se nota en la figura 5 que si  $\Delta E_{pq}$  es grande, su probabilidad de aceptarlo será muy pequeña; es decir energías muy lejos de la energía de la anterior configuración serán de seguro rechazadas.

Cuando  $J = 0$ , el hamiltoniano (1) se reduce a aquel para espines independientes en un campo magnético externo, un problema soluble por medios elementales. Para este caso se puede verificar las expresiones analíticas para los observables termodinámicas con las reproducidas por un programa usando el algoritmo descrito arriba.

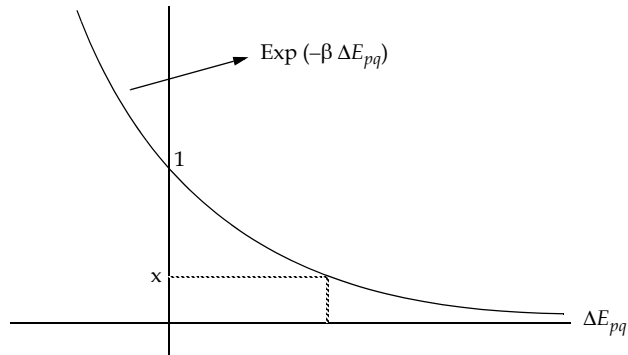


Figura 5. Gráfico que muestra el algoritmo Metrópolis

Se ha elaborado un programa en lenguaje Pascal que considera una red de  $N \times N$  espines en ausencia de un campo magnético  $H = 0$ . Se estudia luego su comportamiento en función de una secuencia de acoplamientos ferromagnéticos  $K = \beta J$  de 0,1 a 0,6 y se compara con el comportamiento exacto de una red infinita; hay que poner particular atención en la región cercana a la transición de fase esperada  $K_C = 0,44069$ . También se puede calcular las correlaciones entre los espines (cálculo no incluido en el presente artículo) y mostrar que ellas llegan a ser muy fuertes cuando el sistema está cercano a la transición de fase.

Finalmente podemos extender el cálculo para explorar la termodinámica del modelo de  $H$  finito y acoplamientos antiferromagnéticos ( $J < 0$ ).

## RESULTADOS

### \* Efecto de la configuración inicial

A continuación se mostrarán los gráficos realizados por un programa hecho en Pascal para un magneto Ising de  $160 \times 160$  números de espines donde se ha tomado  $2 \times 10^6$  pasos. Un espin hacia arriba se representa en el gráfico por un color negro y un espin hacia abajo por color blanco. El programa parte de una configuración inicial ordenada en dos versiones: "checkerboard" o tablero de damas y de "interface". En el primero los espines

están dispuestos como en un tablero de damas es decir un espin hacia arriba así como sus diagonales pero a sus cuatro costados espines hacia abajo. En el segundo la mitad del cuadrado tiene espin hacia arriba y la otra mitad hacia abajo.

En lo que sigue se colocaran las temperaturas como números puros pero se da por entendido que están en unidades de  $J/k_B$ . Así  $T_C = 2,269$  significará realmente  $T_C = 2,269 J/k_B$ .

En la figura 6 se muestra las dos configuraciones iniciales usadas: interface (6 a) y checkerboard (6 b). Se toma  $T'' = 2,3$  (es decir  $T'' \approx T_C$ ) como la temperatura de referencia.

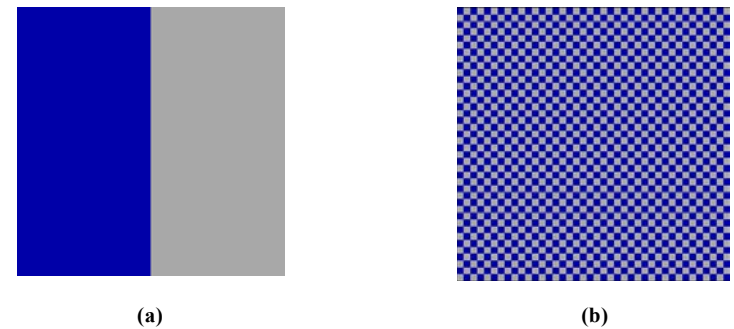


Figura 6. Configuraciones iniciales: a) "interface" y b) "checkerboard"

En primer lugar se trata el caso de la configuración interface. En la figura 7 a se muestran los estados finales obtenidos para  $T = 0,5$  ( $T < T''$ ). En las figuras 7 b y 7 c se muestran los estados finales para  $T = T''$  y  $T = 5$  ( $T > T''$ ) respectivamente.

Luego se trata el caso de configuración "checkerboard". Las figuras 8 a, 8 b, y 8 c muestran los estados finales a las que se llegó para las mismas temperaturas del caso anterior.

Se puede ver que para  $T > T''$  en ambas configuraciones iniciales el estado final es aleatorio; con  $T \gg T''$  los espines están distribuidos de manera muy aleatoria es decir que no hay correlaciones entre los espines. En cambio para  $T < T''$  el sistema es ordenado. En la configuración "interface" casi no varía su estado inicial, acentuándose más para  $T \ll T''$ ; en la configuración



“checkerboard” se van formando unos cuantos dominios magnéticos los cuales son más definidos para  $T \ll T''$ .

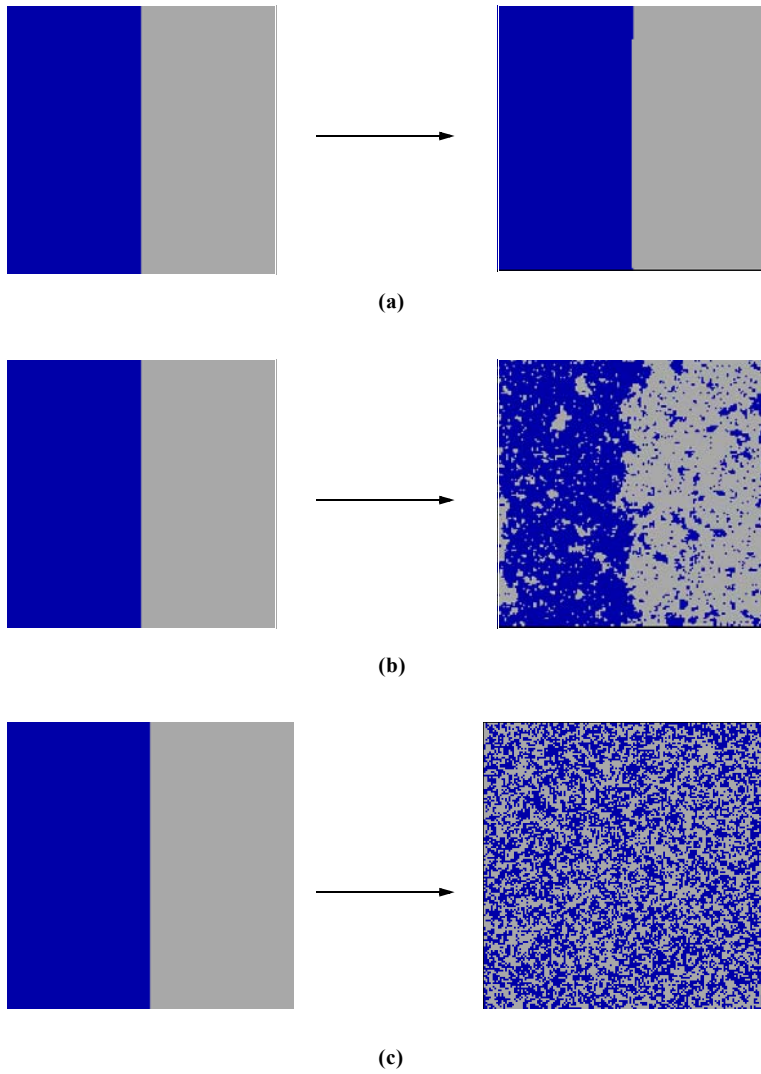


Figura 7. Estados finales (derecha) para diferentes temperaturas usando una configuración interface como inicial : a)  $T = 0,5$ ; b)  $T = 2,3$  y c)  $T = 5$

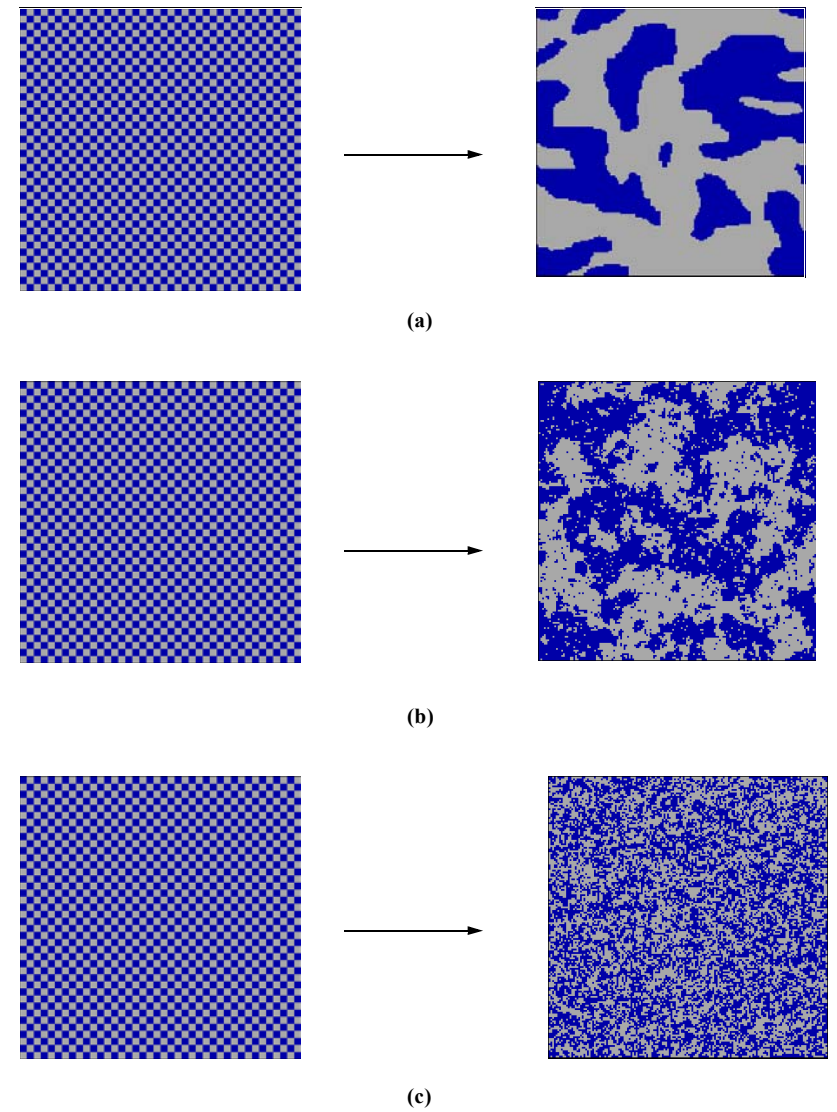


Figura 8. Estados finales (derecha) para diferentes temperaturas usando una configuración checkerboard como inicial : a)  $T = 0,5$ ; b)  $T = 2,3$  y c)  $T = 5$

\* **Influencia del descenso acelerado o lento de la temperatura sobre el magneto Ising**

Ahora veamos cuál es el estado final de un magneto Ising cuando bajamos la temperatura desde valores lejanos de la temperatura crítica  $T_i \approx 2 T_C$ , haciéndolo primero de manera acelerada y después lentamente. En la figura 9 se partió de una temperatura inicial  $T_i = 5$  y se fue disminuyendo en intervalos de  $\Delta T = 0,5$  hasta la temperatura final  $T_f = 0,5$ . En la figura 10 se inició la temperatura en  $T_i = 4$  bajándola hasta  $T_f = 0,1$  en intervalos de  $\Delta T = 0,1$

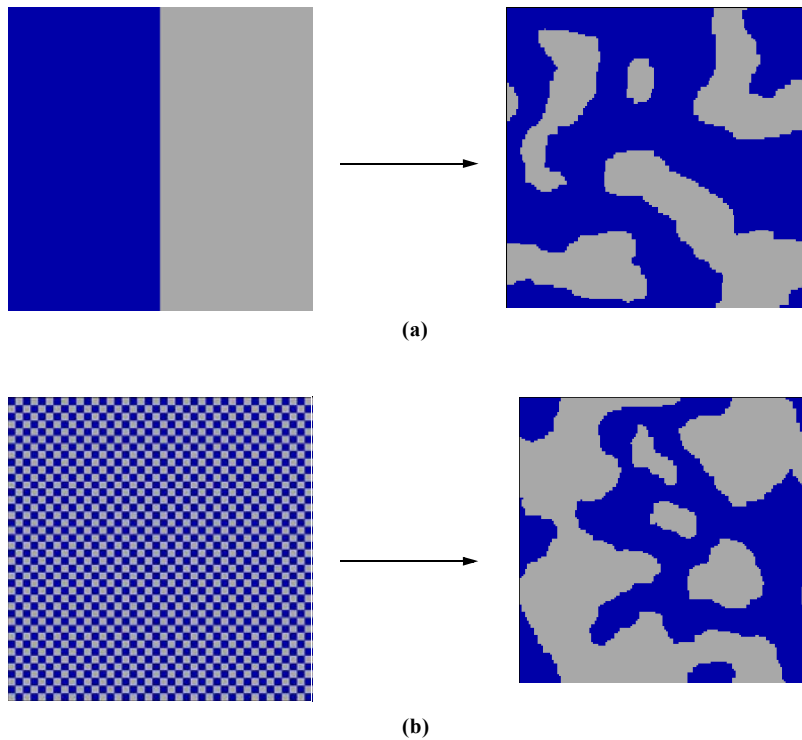


Figura 9. Estados finales (derecha) para un descenso “rápido” de temperatura con  $T_i = 5$ ,  $\Delta T = 0,5$  y  $T_f = 0,5$  usando configuraciones iniciales: a) interface y b) checkerboard

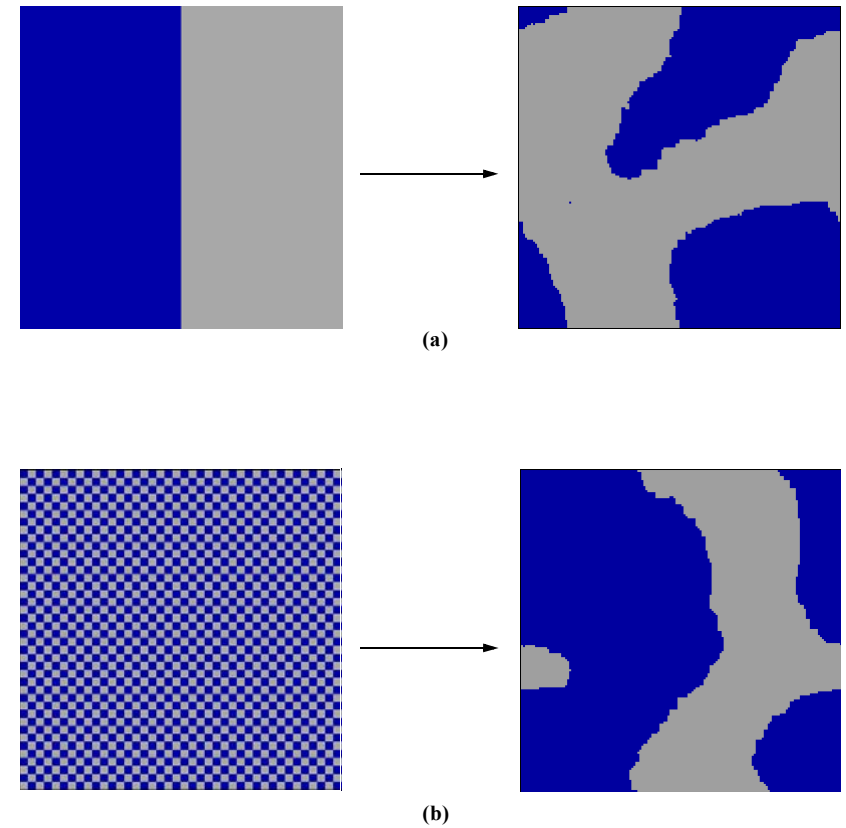


Figura 10. Estados finales (derecha) para un descenso “lento” de temperatura con  $T_i = 4$ ,  $\Delta T = 0,1$  y  $T_f = 0,1$  usando configuraciones iniciales: a) interface y b) checkerboard.

## Conclusiones

- En nuestro modelo alrededor de  $T'' = 2,3 \sim T_C$  se observa el cambio de una fase ordenada ( $T < T''$ ) a otra fase desordenada ( $T > T''$ ), tal como lo predice la solución exacta de un magneto de Ising bidimensional. A pesar de que estas observaciones corresponden a un magneto de Ising de  $N = 160 \times 160$  espines se puede observar que el modelo muestra las características más importantes de un material ferromagnético.
- Cuando la configuración inicial es “checkerboard”, a una temperatura menor que la crítica, la configuración final es diferente a la inicial. Sin embargo se observa cierto orden, formándose regiones bien definidas donde los espines con un mismo sentido están agrupados formando “dominios magnéticos”. El cambio puede explicarse por el débil acoplamiento inicial de la configuración.  
Cuando la configuración inicial es “interface”, se confirma el hecho de que las regiones iniciales de espin bien definido pierden su ordenamiento para  $T > T''$  y lo conservan para  $T < T''$ , lo cual está de acuerdo con lo esperado para un arreglo infinito de espines. Para  $T < T''$  el hecho de que el estado final no cambia sustancialmente, se explica por el fuerte acoplamiento inicial de la configuración.
- Se observa que cuando el descenso en  $T$  es lento los dominios tienen mayor tamaño que cuando se desciende rápidamente. Esto se puede explicar teniendo en cuenta que al bajar lentamente la temperatura los espines se acoplan a su entorno. Esto ocurre en menor proporción cuando se baja la temperatura rápidamente, demostrando así la consistencia del método probabilístico Montecarlo - Metrópolis.

## Bibliografía

- [1] **H.J. Maris & L.J. Kadanoff**, Am. J. Phys. **46**, 652 (1978)
- [2] **D. Chandler**. Introduction to Modern Statistical Mechanics. Oxford University Press 1987.
- [3] **L. Onsager**, Phys. Rev. **65**, 117 1944.
- [4] **K. Huang**. Statistical Mechanics. John Willey, New York, 1987.
- [5] **M. Peña**. Termodinámica Estadística, Alambra 1979.
- [6] **D. Goodstein**. States of Matter. Prentice - Hall, 1975.
- [7] **F. Reif**. Fundamentos de Física Estadística y Térmica, McGraw Hill Book Company, 1968.