

Análisis de Transiciones de Fase en un Ferromagneto ideal aplicando el Método Monte Carlo a los Modelos de Ising y Heisenberg en 2 y 3 dimensiones

Antonio Zegarra Borrero [†] y Héctor Loro Ramírez [‡]

Instituto de Física. Facultad de Ciencias.

Universidad Nacional de Ingeniería;

[†]antoniozb124@gmail.com, [‡]hloro@uni.edu.pe

Recibido el 21 de Marzo del 2013; aceptado el 21 de Abril del 2013

Se presentan resultados obtenidos al aplicar el Método Monte Carlo a los modelos de Ising y Heisenberg para un cristal en 2 y 3 dimensiones, donde se encontraron transiciones de fase ferromagnética. En particular se muestra el diagrama de fase de Magnetización ($|M|$) vs. Temperatura (T) del sistema Heisenberg 3D para 3 tipos de red (sc, bcc y fcc) con el fin de visualizar dicho cambio de fase y calcular la respectiva temperatura crítica T_c . Luego se presentan en una tabla los valores de T_c obtenidos para los sistemas analizados (Ising 2D, Heisenberg 2D, Ising 3D y Heisenberg 3D), donde en los casos 3D se consideraron las estructuras cristalinas cúbicas mencionadas. Teniendo en cuenta que en una vecindad del punto crítico ($T \approx T_c$, $H \approx 0$) las principales cantidades termodinámicas obedecen leyes de escala universal, se calcularon numéricamente para cada sistema los principales exponentes críticos ($\beta, \alpha, \gamma, \delta$) a partir de sus respectivos diagramas de fase, lo cual permitió verificar el fenómeno de universalidad para cada sistema 3D.

Palabras Claves: Modelos de Ising y Heisenberg, ferromagnetismo, transiciones de fase, método Monte Carlo, punto crítico, exponentes críticos, universalidad.

Some results obtained from applying the Monte Carlo method to the models of Ising and Heisenberg for a crystal in 2 and 3 dimensions, where ferromagnetic phase transitions were detected, are presented. In particular, the Magnetization ($|M|$) vs. Temperature (T) phase diagram is shown for 3 kinds of lattices (sc, bcc and fcc) for the Heisenberg 3D system in order to visualize the phase transition and calculate the respective critical temperature T_c . Then the values of T_c obtained for each of the analyzed systems (Ising 2D, Heisenberg 2D, Ising 3D y Heisenberg 3D) are presented in a table, where we considered for each 3D case the cubic crystalline structures mentioned. Taking into account that in a vicinity of the critical point ($T \approx T_c$, $H \approx 0$) the main thermodynamic quantities obey universal scaling laws, the main critical exponents ($\beta, \alpha, \gamma, \delta$) were calculated numerically for each system from their respective phase diagrams, this permitted to verify the phenomenon of universality for each 3D system.

Keywords: Models of Ising and Heisenberg, ferromagnetism, phase transitions, Monte Carlo method, critical point, critical exponents, universality.

1. Introducción

El estudio teórico del ferromagnetismo es muy complejo y por ello se han construido modelos simplificados capaces de capturar la física esencial del problema, siendo los más famosos los de Ising y Heisenberg, que permiten analizar la termodinámica de un ferromagneto ideal y simular transiciones de fase. Sin embargo, pese a haber idealizado el sistema con estos modelos, la solución analítica de los mismos es imposible para más de 2 dimensiones y ello ha conllevado a la necesidad de realizar diferentes aproximaciones teóricas para poder aplicarlos, entre las cuales resaltan la teoría de campo medio ([1], [2], [3], [4], [6]), la teoría de Landau [1], aproximaciones de Bragg-Williams y de Bethe-Peierls [2] y la rigurosa teoría de grupo de renormalización ([1], [4]).

Pese a que las mismas predicen transiciones de fase y permiten calcular temperaturas de transición y exponentes críticos, poseen un error involucrado que general-

mente resulta incompatible con resultados experimentales y por ello resulta necesario recurrir al método Monte Carlo, que tiene mayor precisión debido a que se fundamenta en el teorema estadístico de la Ley de grandes números. El método Monte Carlo Metropolis permite generar estados o configuraciones aleatorias que sigan la distribución del ensamble (en nuestro caso usamos el ensamble canónico) de forma que para valores fijos de temperatura (T) y campo externo (H) podamos calcular de manera única (en el equilibrio) los valores de las demás cantidades de interés (magnetización M , capacidad calorífica C_H y susceptibilidad magnética χ_H) y construir sus respectivos diagramas de fase. A partir de estos diagramas de fase se puede encontrar transición de fase, calcular la temperatura crítica y los principales exponentes críticos para ser comparados con los de otras aproximaciones teóricas.

2. Los modelos de Ising y Heisenberg

En estos modelos se considera que cada átomo del cristal posee un momento magnético definido (momento angular de espín $s = \frac{1}{2}$), el mismo que interactúa con algún campo magnético externo mediante interacción dipolar y con sus primeros vecinos vía la interacción de intercambio, la misma que resulta de la interacción electrostática en combinación con el principio de exclusión de Pauli [8]. Cada sistema es descrito por un hamiltoniano cuyos autovalores dan las energías de los estados (configuraciones) accesibles al sistema.

El **modelo de Ising**, usado para modelar ferromagnetos uniaxiales, considera que cada espín individual puede alinearse en 2 direcciones posibles (en forma paralela o antiparalela al campo) y su hamiltoniano (para el caso isotrópico) se escribe como:

$$H^{(I)}(\{S_\alpha\}_{\alpha=1}^N) = -\mu H \sum_{\alpha} S_\alpha - J \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} S_\alpha S_\beta \quad (1)$$

($S_\alpha = \pm 1$; $\alpha, \beta = 1, \dots, N$.) donde S_α (S_β) denota la variable de espín del átomo localizado en la posición \vec{r}_α (\vec{r}_β), J es la integral de intercambio (positiva para tener ferromagnetismo) que mide la energía de interacción entre espines vecinos, H el campo magnético externo, μ la magnitud del momento dipolar magnético ($m_\alpha = \mu S_\alpha$) y la expresión $\langle \alpha, \beta \rangle$ en la segunda suma (doble) indica que se suma sobre primeros vecinos (ver [1]). De aquí podemos identificar a cada estado del sistema como $|\nu \rangle \equiv |S_1, S_2, \dots, S_\alpha, \dots, S_N \rangle$, de manera que tenemos un total de $\Omega = 2^N$ estados para un sistema de N átomos.

Más adelante, W. Heisenberg propuso un modelo basado en la mecánica cuántica que desarrolló y que considera los espines como operadores vectoriales \hat{S}_α , donde cada momento magnético es un vector en el espacio y por tanto permite modelar cristales no necesariamente uniaxiales. El hamiltoniano para el **modelo de Heisenberg** (caso isotrópico) se escribe como:

$$\hat{H}^{(H)}(\{\hat{S}_\alpha\}_{\alpha=1}^N) = -\mu \vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \hat{S}_\alpha - J' \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} \hat{S}_\alpha \cdot \hat{S}_\beta \quad (2)$$

donde el significado físico de los términos involucrados es el mismo que en el modelo anterior, aunque se debe considerar una integral de intercambio diferente ($J' = 2J$) para que dichos modelos sean compatibles (esto se puede verificar teniendo en cuenta la forma de actuar de los operadores de espín y que la diferencia energética entre 2 espines paralelos y antiparalelos debe ser la misma en ambos modelos [3]). Esto fue importante en las simulaciones porque el valor de la temperatura crítica T_c se mide en términos de J , de modo que para comparar temperaturas de transición entre diferentes modelos hay q considerar dicha relación entre J y J' (si el sistema físico es el mismo, los resultados de usar un modelo u otro para simularlo no

deberían diferir mucho). Hay que indicar que aunque los hamiltonianos de ambos modelos son cuánticos (espectro discreto de energías), la estadística bajo la cual se ha tratado a los mismos es clásica [5]. Asimismo, de no existir correlaciones entre espines vecinos cada sistema bajo análisis sería factorizable (se calcularía su función de partición a partir de la función de partición de cada átomo) y se pasaría de estudiar ferromagnetismo a paramagnetismo. Es el término de interacción entre primeros vecinos el que hace imposible un cálculo exacto de la función de partición $Z(T, H, N)$ en ambos modelos y por tanto imposible el estudio de su termodinámica (si se lograra calcular Z entonces se podría conocer su energía libre $F = -k_B T \ln(Z)$ y con ello cualquier otra cantidad termodinámica).

3. Transiciones de fase y universalidad

Las transiciones de fase se clasifican como de primer o de segundo orden, siendo las de primer orden aquellas detectables a nivel microscópico y las de segundo orden aquellas que separan fases de diferente simetría (fases ordenada y desordenada) [1], siendo el ferromagnetismo un caso particular de las de segundo orden. Si medimos la magnetización M de un ferromagneto en función de la temperatura T para campo externo nulo ($H = 0$) obtendremos (Figura 1(A)) que la misma decrece continuamente desde su valor máximo de saturación para $T = 0$ hacia cero para $T = T_c$ y es nula para $T \geq T_c$. Por otro lado, si graficamos el calor específico a campo constante C_H (en este caso $H = 0$) en función de T se aprecia un pico para $T = T_c$ y un decaimiento para $T > T_c$ (Figura 1(B)). El comportamiento de estas cantidades cerca del punto crítico se verifica experimentalmente y en este trabajo se buscó hacerlo computacionalmente.

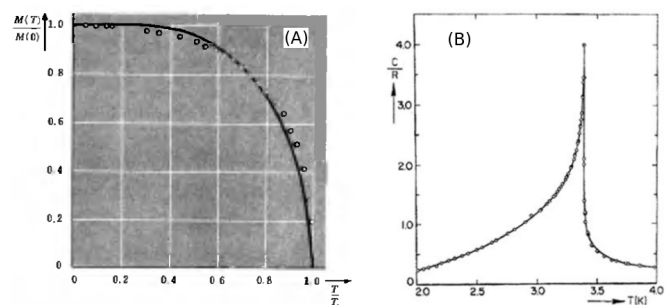


Figura 1: (A) Magnetización espontánea M en un ferromagneto en función de la temperatura T para campo externo nulo ($H = 0$) donde los puntos indican valores experimentales para el nickel (P. Weiss y R. Forrer, *Ann. Phys.*, vol. 5, p. 153 (1926)). (B) Calor específico para un ferromagneto en función de T (para $H = 0$) donde los puntos representan valores experimentales (J.C. Wright et al., *Phys. Rev. B* 3, 843 (1971)).

Un fenómeno interesante que ocurre en este tipo de transiciones de fase es que las principales cantidades termodinámicas (magnetización M , calor específico C_H ,

susceptibilidad magnética χ_H) exhiben leyes de escala universal en una vecindad del punto crítico ($T \approx T_c, H \approx 0$):

$$M \sim (-t)^\beta, C_H \sim (t)^{-\alpha}, \chi_H \sim (t)^{-\gamma}, M \sim H^{1/\delta} \quad (3)$$

(siendo $t = T - T_c$) donde en las 3 primeras relaciones nos acercamos al punto crítico en la dirección $T \rightarrow T_c, H = 0$ y en el último caso en dirección $H \rightarrow 0, T = T_c$. Esto fue relevante para las simulaciones porque se construyeron 2 tipos de algoritmos: uno en que se mantenía fijo el campo H (en cero) y se variaba T y otro en que se variaba H manteniendo fija T (en T_c). Los valores que toman los exponentes críticos $\beta, \alpha, \gamma, \delta$ resultan ser independientes de la estructura cristalina del sistema para una dimensión fija, fenómeno al cual se le denomina universalidad [1].

4. El Método Monte Carlo

Consideremos un observable A talque su valor en el estado $|\nu\rangle$ viene dado por A_ν (su autovalor), esta cantidad puede ser la energía E_ν o magnetización M_ν , ya que están definidas para cada estado del sistema (cantidades microscópicas). El valor macroscópico (termodinámico) $\langle A \rangle$ de dicha cantidad física viene dado por el promedio de la misma respecto a la distribución del ensamble (en este caso el canónico):

$$\langle A \rangle = \sum_\nu A_\nu P_\nu, \quad P_\nu = e^{-\beta E_\nu} / Z \quad (4)$$

Para calcular la función de partición $Z = \sum_\nu \exp\{-\beta E_\nu\}$ de un cristal de N átomos magnéticos debemos sumar un total de $\Omega = 2^N$ factores de Boltzmann (uno para cada estado $|\nu\rangle$). Si consideramos un pequeño cristal cúbico de 10 espines por lado (un total de $N = 10^3$ espines) entonces un ordenador capaz de sumar 10^6 términos por segundo demoraría un total de 10^{288} años en calcular Z . Esto resulta inaplicable y por ello debemos buscar un método alternativo para simplificar dicho cálculo.

La solución a este problema viene dada con la aplicación del Método Monte Carlo. Este método consiste en generar estados aleatorios partiendo de cierto estado inicial y en la elección adecuada de una tasa de transición en cada paso que permita al estado del sistema seguir una distribución estacionaria luego de cierto número de transiciones. Mediante este proceso se van descartando aquellos estados poco probables de ocurrir y nos permite considerar solo aquellos estados más probables (por los cuales el sistema pasa más seguido). Una vez que el sistema alcanza el equilibrio podemos realizar el promedio aritmético de los valores que toma A_ν en estos estados (donde A_ν oscila poco) para calcular el respectivo valor macroscópico [4]. Distinguir luego de cuántas transiciones el sistema ha alcanzado el equilibrio puede llegar a ser un trabajo complejo porque ello depende de muchas variables (número de pasos, dimensión del arreglo, tipo de red, etc...), pero una vez que se consigue esto el problema se reduce a promediar sobre dichos estados. Detalles

respecto de cómo funciona dicho método y del algoritmo en cuestión, así como del error involucrado, pueden encontrarse en [1], [4], [9] y [10].

Lo importante es tener en cuenta que a lo largo de una trayectoria Monte Carlo (en la cual se generan los estados aleatorios mencionados), se mantienen fijos los valores de T y H , de manera que $\langle A \rangle = \langle A \rangle(T, H)$. Para valores fijos de T y H podemos por tanto calcular la energía media $\langle E \rangle(T, H)$ y magnetización media $\langle M \rangle(T, H)$, así como los promedios de sus cuadrados, lo cual permite calcular $C_H(T, H)$ y $\chi_H(T, H)$ a partir de [1]:

$$C_H = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) / (k_B T^2)$$

$$\chi_H = (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) / (k_B T)$$

y variando adecuadamente T (o H) podemos construir los respectivos diagramas de fase vs. T (o vs. H).

5. Algoritmo usado en el modelo de Heisenberg

Para simular este sistema en 2 dimensiones podemos considerar una red cuadrada de n espines por lado (un total de $N = n \times n$ espines), donde en cada punto (i, j) de la red tenemos un átomo con momento magnético $\vec{m}_{i,j} = \mu \vec{S}_{i,j}$ y representamos su espín por un vector unitario $\vec{S}_{i,j} = (\cos \phi_{i,j}) \vec{e}_1 + (\sin \phi_{i,j}) \vec{e}_2$ (expresado en términos de la base canónica de vectores en el plano cartesiano $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2\}$). De esta forma el estado del sistema queda especificado dando los vectores unitarios $\vec{S}_{i,j}$ para todos los puntos de la red ($i, j = 1, \dots, n$), lo cual es equivalente a fijar los ángulos $\phi_{i,j}$ en dichos puntos del arreglo.

Para especificar el estado del sistema se introduce la matriz Φ , cuya dimensión depende del número de espines considerado y cuyos elementos de matriz $[\Phi]_{i,j} = \phi_{i,j}$ son ángulos que especifican las direcciones de los espines en cada punto de la red. En nuestro algoritmo consideramos 8 direcciones posibles en el plano

$$\phi_{i,j} = 0, \pi/4, \pi/2, 3\pi/4, \pi, 5\pi/4, 3\pi/2, 7\pi/4$$

y tanto el campo externo \vec{H} como la magnetización del sistema \vec{M} son vectores en el plano: $\vec{M} = M_x \vec{e}_1 + M_y \vec{e}_2$, $\vec{H} = H_x \vec{e}_1 + H_y \vec{e}_2$. La magnetización del sistema en un estado $|\Phi\rangle$ (valor microscópico de la misma) del sistema viene dada por

$$\vec{M}(|\Phi\rangle) \equiv \vec{M}_\Phi = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \vec{m}_{i,j} = \mu \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \vec{S}_{i,j} \quad (5)$$

y la energía del momento magnético $\vec{m}_{i,j}$ localizado en la posición (i, j) se escribe como $E(\vec{m}_{i,j}) = -\mu \vec{H} \cdot \vec{S}_{i,j} - J' \vec{S}_{i,j} \cdot (\vec{S}_{i-1,j} + \vec{S}_{i+1,j} + \vec{S}_{i,j-1} + \vec{S}_{i,j+1})$, de manera que la energía total (valor microscópico de la misma) para un estado arbitrario $|\Phi\rangle$ del sistema puede ser escrita en la forma

$$E(|\Phi\rangle) \equiv E_\Phi = -\vec{H} \cdot \vec{M}_\Phi - \frac{J'}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \vec{S}_{i,j} \cdot (\vec{\Xi}_{i,j}) \quad (6)$$

$$\vec{\Xi}_{i,j} = \vec{S}_{i-1,j} + \vec{S}_{i+1,j} + \vec{S}_{i,j+1} + \vec{S}_{i,j-1} \quad (7)$$

donde el factor $\frac{1}{2}$ aparece porque la suma doble cuenta 2 veces las energías de interacción entre cada par de vecinos y se debe tomar $J' = 2J$ para comparar los resultados de este modelo con los del de Ising. Para el cálculo de los valores microscópicos E_Φ y \vec{M}_Φ se consideró la Condición de Contorno Periódica (CCP) para hacer a la red infinita y tener a nuestro sistema en un foco térmico de manera que sus estados sigan la distribución canónica. La CCP se puede expresar como:

$$\begin{aligned} i = 1 &\rightarrow \Phi(i-1, j) = \Phi(n, j) \\ i = n &\rightarrow \Phi(i+1, j) = \Phi(1, j) \\ j = 1 &\rightarrow \Phi(i, j-1) = \Phi(i, n) \\ j = n &\rightarrow \Phi(i, j+1) = \Phi(i, 1) \end{aligned}$$

Esta forma de calcular E_Φ y \vec{M}_Φ debe ser programada adecuadamente para aplicar el método de Monte Carlo que permite generar las matrices aleatorias Φ y con ello calcular las cantidades termodinámicas mencionadas previamente (un planteamiento similar para el modelo de Ising puede hallarse en [7]). En la Figura 2 se visualiza el campo vectorial de espines en el plano mencionado así como la matriz que representa al estado del sistema.

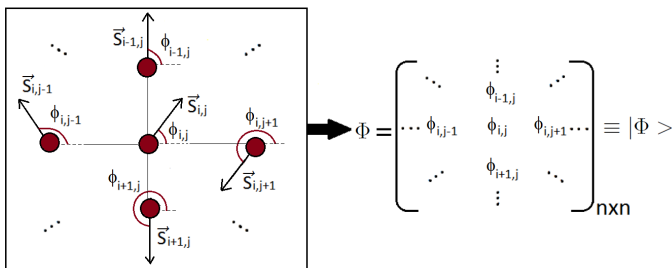


Figura 2: A la izquierda se muestra un átomo localizado en la posición (i, j) con espín $\vec{S}_{i,j}$ rodeado de sus 4 primeros vecinos. A la derecha se da la representación matricial de este arreglo de espines donde en este caso $\phi_{i,j} = \pi/4$, $\phi_{i-1,j} = \pi/2$, $\phi_{i,j+1} = 5\pi/4$, $\phi_{i,j-1} = 3\pi/4$, $\phi_{i+1,j} = 3\pi/2$. La red está formada por un total de $n \times n$ espines.

Extrapolando las ideas previas al caso 3D (red de $N = n \times n \times n$ espines), diremos que el átomo localizado en la posición (i, j, k) de la red tiene vector momento magnético $\vec{m}_{i,j,k} = \mu \vec{S}_{i,j,k}$, siendo

$$\vec{S}_{i,j,k} = (\sin \theta_{i,j,k} \cos \phi_{i,j,k}) \vec{e}_1 + (\sin \theta_{i,j,k} \sin \phi_{i,j,k}) \vec{e}_2 + (\cos \theta_{i,j,k}) \vec{e}_3$$

un vector unitario expresado en términos de la base canónica de vectores en el espacio euclidiano tridimensional $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$. De esta manera el estado del sistema

queda especificado dando los vectores unitarios $\vec{S}_{i,j,k}$ para todos los puntos de la red $(i, j, k = 1, \dots, n)$, lo cual es equivalente a fijar los ángulos $\phi_{i,j,k}$ y $\theta_{i,j,k}$ para dichos puntos del arreglo. Para especificar el estado se introducen las matrices tridimensionales Φ de elementos $\Phi(i, j, k) = \phi_{i,j,k}$ y Θ de elementos $\Theta(i, j, k) = \theta_{i,j,k}$ (en el algoritmo se consideró un total de 8 direcciones posibles para el ángulo azimutal $\phi_{i,j,k}$ y 5 direcciones para el ángulo orbital $\theta_{i,j,k}$) y el estado del sistema lo podemos denotar por $|\nu\rangle = |\Phi\rangle \otimes |\Theta\rangle$ como se muestra en la Figura 3.

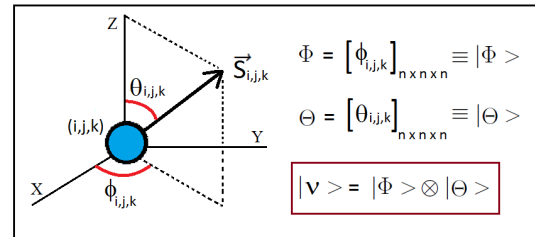


Figura 3: Se muestra un átomo localizado en la posición (i, j, k) con espín $\vec{S}_{i,j,k}$ y se dan las respectivas representaciones matriciales para las direcciones (Φ y Θ) que especifican el estado $|\nu\rangle = |\Phi\rangle \otimes |\Theta\rangle$ del arreglo total de espines. La red está formada por un total de $n \times n \times n$ espines.

Aquí el algoritmo para calcular la energía del sistema fue mucho más complejo debido a que se tomaron 3 estructuras cristalinas distintas y además debe considerarse la CCP en ambas matrices. Por otro lado, la forma de variar T (o H) y en cada caso generar trayectorias Monte Carlo para calcular valores medios se mantiene invariante. En [11] se muestra en detalle la lógica de estos algoritmos tanto para el modelo de Heisenberg como para el más sencillo modelo de Ising (ambos modelos en 2 y 3 dimensiones).

6. Principales resultados

A continuación se presentan algunos resultados obtenidos de las simulaciones realizadas. En la Figura 4 se muestran los diagramas de fase $|\vec{M}|$ vs. T para 3 tipos de red (sc, bcc y fcc) y la curva de saturación M_z vs. H_z para $T = T_c$ (solo para la red sc) del sistema Heisenberg 3D. El cambio esperado en $|\vec{M}|$ para $T \approx T_c$ permite calcular el valor de T_c para cada tipo de red y se ve que la misma crece al aumentar el respectivo número de coordinación c (como lo predice también campo medio). En la Figura 4 se muestra (en los ejes) en términos de qué se miden las principales cantidades de interés; por otro lado, los diagramas de fase para C_H y χ_H pueden encontrarse en [11] para todos los sistemas simulados.

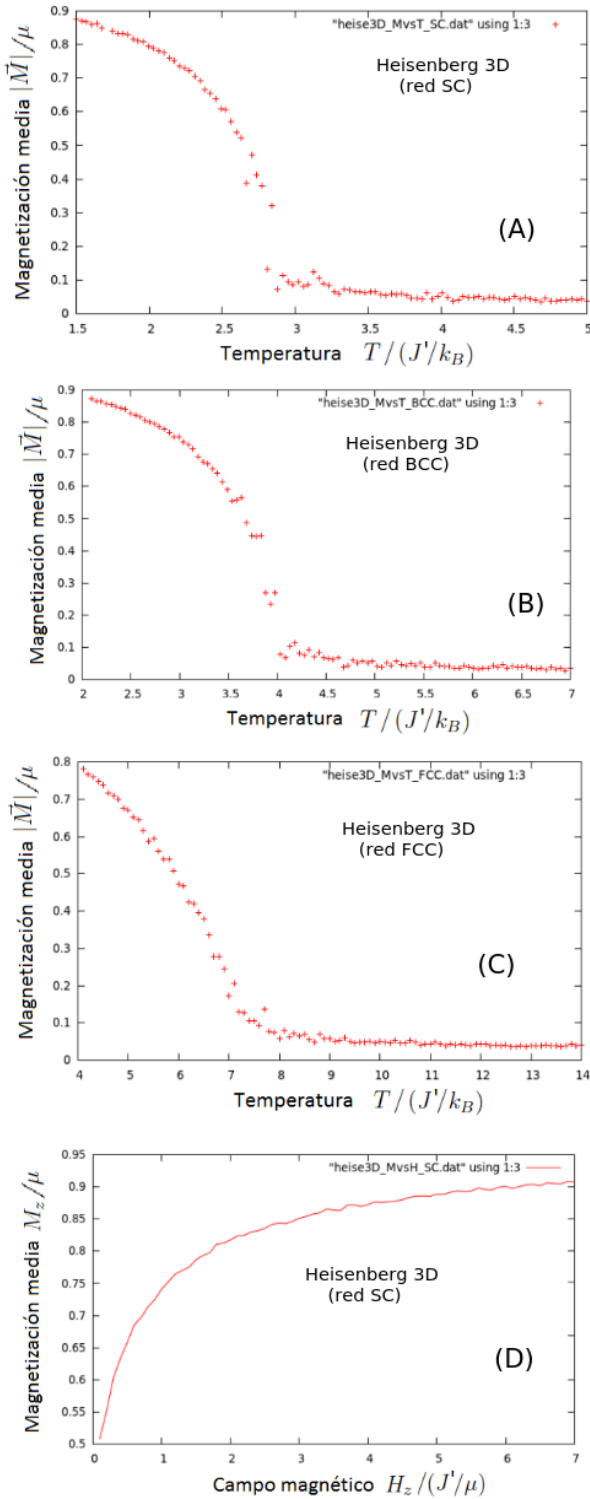


Figura 4: Diagramas de fase $|\vec{M}|$ vs. T para 3 redes cúbicas del sistema Heisenberg 3D: (A) red SC ($c = 6$), (B) red BCC ($c = 8$), (C) red FCC ($c = 12$). De cada figura es posible detectar transición de fase, calcular la respectiva T_c (en unidades de J'/k_B) y el exponente crítico β para cada caso. En (D) se muestra la curva de saturación M_z vs. H_z (campo aplicado a lo largo de la dirección z) para $T \approx T_c$ (red SC), de donde se pudo calcular el exponente δ .

De manera similar se calcularon las temperaturas críticas para el caso de Ising. Los resultados se muestran en la siguiente tabla (Tabla 1), donde hay que tener en cuenta que para comparar los resultados entre un modelo

y otro (Ising y Heisenberg) se debe considerar $J' = 2J$.

Sistema	$T_c(J/k_B)$	Sistema	$T_c(J'/k_B)$
I. 2D	2.4	H. 2D	1.4
I. 3D (SC)	4.6	H. 3D (SC)	2.8
I. 3D (BCC)	6.8	H. 3D (BCC)	4.0
I. 3D (FCC)	12.6	H. 3D (FCC)	7.5

Tabla 1: Temperaturas críticas obtenidas para los sistemas simulados (I denota Ising y H Heisenberg).

De la Tabla 1 se observa que si consideramos $J' \approx 2J$ entonces las temperaturas críticas calculadas para el modelo de Heisenberg resultan ser mayores que las obtenidas para el modelo de Ising en una magnitud de entre 1 y 1.4 (J/k_B) (Las temperaturas calculadas para el modelo de Heisenberg son más precisas porque este sistema no exhibe fluctuaciones tan grandes como el de Ising en una vecindad del punto crítico [11]). Para el modelo de Ising la aproximación de campo medio predice $T_c = cJ/k_B$ (siendo c el número de coordinación) y se observa que esta aproximación es muy buena para la red FCC ($c = 12$), lo cual verifica que dicha aproximación mejora con el aumento en el número de coordinación.

Comparaciones entre los diagramas de fase para los modelos de Ising y Heisenberg (en este último se reduce el ruido en la zona crítica) así como la verificación cualitativa y cuantitativa del fenómeno de universalidad pueden encontrarse en [11]. En la siguiente tabla (Tabla 2) se muestran los resultados de calcular numéricamente los principales exponentes críticos (n indica el número de espines por lado del arreglo en el caso 2D):

Resultados de las simulaciones:

Sistema termodinámico	β	α	γ	δ
I. (n=10)	0.464	0.085	1.083	13.24
I. 2D (n=20)	0.476	0.068	1.049	12.3
I. 3D (SC)	0.315	0.132	0.675	5.18
I. 3D (BCC)	0.313	0.113	0.636	4.47
I. 3D (FCC)	0.340	0.131	0.45	2.72
H. 2D (n=10)	0.445	0.061	1.28	3
H. 2D (n=20)	0.58	0.051	1.12	3.22
H. 3D (SC)	0.356	0.125	0.621	6.06
H. 3D (BCC)	0.342	0.055	0.524	5.09
H. 3D (FCC)	0.340	0.165	0.557	3.65

Tabla 2: Principales exponentes críticos obtenidos para los sistemas simulados. En los sistemas bidimensionales se muestran resultados de considerar $n = 10$ y $n = 20$ espines por lado de la red. Para los sistemas tridimensionales se especifica el tipo de red y para todos se consideró 10 espines por lado.

Resultados dados en la bibliografía ([1] y [2]):

Modelo	β	α	γ	δ
Ising 2D	0.125	0	1.75	15
Ising 3D	0.324	0.11	1.24	4.82
Landau y Campo Medio	0.5	0	1	3

Tabla 3: Algunos resultados encontrados en las referencias bibliográficas para los exponentes críticos.

De la Tabla 2 podemos ver que para ambos tamaños de la red **Ising 2D** ($n = 10$ y $n = 20$) los exponentes críticos permanecen invariantes (lo cual es de esperarse porque los mismos solo dependen del sistema bajo análisis). En este caso el exponente β se aproxima mucho al valor dado por Landau (Tabla 3), α toma un valor pequeño pero no nulo como sugiere la teoría, γ se acerca más a Landau que al resultado exacto y δ toma prácticamente el valor exacto. Para el caso de **Ising 3D** apreciamos que el exponente β es el mismo para los 3 tipos de red y lo mismo ocurre para el α ; sin embargo, el exponente γ para la red FCC difiere ligeramente, esto se debe a que faltó considerar puntos adicionales en el intervalo de temperaturas, situación que encontramos también en el caso del exponente δ donde al aumentar el número de coordinación se requiere considerar un intervalo más grande para el campo de manera que podamos capturar adecuadamente la región de crecimiento de M con H (detalles sobre esto en [11]). Al comparar los valores obtenidos para el sistema Ising3D entre diferentes tipos de red vemos que los mismos prácticamente coinciden (las incertidumbres respectivas se encuentran en [11]) con los encontrados en la bibliografía.

Para el caso de **Heisenberg 2D** observamos nuevamente que el tamaño de la red no tiene un efecto apreciable en el valor de los exponentes y además podemos ver que los exponentes β , α y γ prácticamente coinciden con los obtenidos para el modelo de Ising (indicios de universalidad al modificar el modelo) excepto para el caso del exponente δ , que no coincide con Ising 2D pero sí con Landau (y por tanto con la aproximación de campo medio), que es un modelo termodinámico que no considera en detalle el tipo de interacción.

En el caso de **Heisenberg 3D** se observa el mismo efecto que en el caso de Ising donde el fenómeno de universalidad de exponentes es claramente apreciable (dentro de cierto margen de error) y donde las variaciones para los 2 últimos exponentes se deben básicamente a que los intervalos (de T y H respectivamente) cambian entre los diferentes tipos de red. Lo más interesante aquí es que los exponentes para Heisenberg 3D prácticamente coinciden con los de Ising3D, lo cual nos lleva a suponer que la universalidad se podría extender de un modelo a otro

en una misma dimensión (2D o 3D).

Otro detalle relevante es que en el cálculo de los exponentes para el modelo de Heisenberg, la correlación de datos mejoró con respecto al modelo anterior. Este detalle se observó en los diagramas de fase para la magnetización, donde el modelo de Heisenberg presentó menor ruido en la zona crítica para todos los tipos de red (resultados que se pueden apreciar en [11]). Esto pareciera indicar que el modelo de Heisenberg clásico es una mejor aproximación (comparado con el de Ising) al sistema físico real donde los espines pueden ser alineados en direcciones arbitrarias en el espacio.

7. Conclusiones

A partir de los diagramas de fase y del cálculo de las temperaturas críticas (mostradas en la Tabla 1) se observa que el método Monte Carlo aplicado a los modelos de Ising y de Heisenberg predice el comportamiento crítico esperado y permite verificar (aproximadamente) el fenómeno de universalidad (a partir de los resultados de la Tabla 2).

Se observaron mayores fluctuaciones en las cantidades de interés (magnetización, calor específico, susceptibilidad) cerca del punto crítico, como lo predice la teoría de Landau para transiciones de fase de segundo orden (como en el caso del agua, donde ocurre el fenómeno de opalescencia crítico).

La ventaja del modelo de Heisenberg respecto al de Ising es que permite reducir el ruido cerca de punto crítico al ser un modelo más cercano a la realidad (donde los espines toman direcciones en el espacio) y no se limita a ferromagnetos uniaxiales (como lo hace el modelo de Ising).

Los algoritmos que se construyeron para simular estos sistemas sirven como punto de partida para estudiar (haciendo ciertas modificaciones en los mismos) transiciones de fase en redes más complejas, el efecto de la interacción entre segundos y terceros vecinos, cambios en las condiciones de contorno (que permiten analizar efectos de tamaño finito [9]) y modelos multiespín [10] (como el modelo de Potts).

1. C. GARROD, *Statistical Mechanics and Thermodynamics Vol. II*. Oxford University Press, 1995.
2. K. HUANG, *Statistical Mechanics*. John Wiley, New York, 1987.
3. W. GREINER, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Springer, 2004.
4. D. CHANDLER, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*. Oxford University Press, 1987.
5. M. SANCHO - J. ORTÍN, *Curso de física estadística*. Edicions de la Universitat de Barcelona, 2001.
6. R. KUBO, *Statistical Physics I, Equilibrium Statistical Mechanics*. Springer, 1992.
7. A. PAREDES - H. LORO, *Método MonteCarlo-Metropolis en la solución del modelo de Ising para el ferromagnetismo*. Revciuni 8, 1, 77, 2004.
8. N. ASHCROFT - N. MERMIN, *Solid State Physics*. Cornell University. Harcourt College Publishers, 1976.
9. K. BINDER - D.W. HEERMANN, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, An introduction*. Springer, 2002.
10. M.E.J NEWMAN - G.T. BARKEMA, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1998.
11. ANTONIO F. ZEGARRA BORRERO, *Tesis de Licenciatura, Universidad Nacional de Ingeniería (por defender)*.