

2ej. 20



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SIMULACION DEL MODELO DE ISING CON EL METODO DE MONTE CARLO: UNA PRESENTACION PEDAGOGICA.

T E S I S

Que para obtener el Título de

F I S I C O

p r e s e n t a :

ANGELICA LEONOR GELOVER SANTIAGO.

México, D.F.

1987



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

PREFACIO.

1

CAPITULO 1. INTRODUCCION A LOS FENOMENOS CRITICOS.

- 1.1 Termodinámica de las Transiciones de Fase. 4
- 1.2 Clasificación de las Transiciones de Fase. Punto Crítico. 8
- 1.3 Exponentes Críticos. 13
- 1.4 Métodos de Solución. 14

CAPITULO 2. MODELO DE ISING.

- 2.1 Magnetismo (Ferro- y Antiferromagnetismo). 19
- 2.2 Modelo de Ising. Definición e Historia. 21
- 2.3 La Solución de Onsager al Modelo Bidimensional. 25
- 2.4 Generalizaciones del modelo de Ising. 27

CAPITULO 3. METODO DE MONTE CARLO.

- 3.1 Introducción. 32
- 3.2 El Método de Monte Carlo en Mecánica Estadística. Algoritmo de Metropolis et. al. 33
- 3.3 Cálculo de las Variables Termodinámicas. 38

CAPITULO 4. DESCRIPCION DEL PROGRAMA DE
COMPUTADORA.

- 4.1 Introducción. 41
- 4.2 Estructura del Programa. 41
- 4.3 Calibración del programa. 45

4.4 Simulación de otros modelos.

48

CAPITULO 5. RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

5.1 Resultados.

51

5.2 Conclusiones.

61

BIBLIOGRAFIA.

64

PREFACIO.

Son objeto de estudio de la mecánica estadística sistemas formados por muchas partículas, tales como sólidos, líquidos, gases, etc. La tarea de comprender el comportamiento de tales sistemas dista mucho de ser trivial debido a su complejidad, sobre todo cuando existen interacciones apreciables entre las partículas que los forman. Por ejemplo un hecho difícil de comprender es el que los átomos que forman un gas puedan condensarse bruscamente para formar un líquido con propiedades muy diferentes.

La razón de la brusquedad de este tipo de transiciones es que la presencia de las interacciones entre las partículas puede dar lugar a un comportamiento cooperativo que involucre a todas ellas. Estos comportamientos cooperativos producen correlaciones entre todas las partículas, por lo que los sistemas se vuelven difíciles de estudiar teóricamente. En principio, la función de partición exacta Z describiría todos estos fenómenos, incluyendo la presencia de transiciones de fase, pero el problema teórico está precisamente en la dificultad para evaluar la función de partición para sistemas de muchas partículas en donde las interacciones entre ellas son apreciables. Por sistemas con interacciones apreciables debemos entender sistemas en los que cada partícula no pueda considerarse independiente de las demás como, por ejemplo, en un gas denso.

En mecánica estadística se considera que un problema está resuelto cuando se ha evaluado su función de partición, ya que entonces pueden calcularse los valores esperados de las observables del sistema. Podemos entonces decir que lo importante es lograr la evaluación de la

función de partición y cuando no es posible hacer esto analíticamente el método de Monte Carlo representa una opción.

El objetivo del presente trabajo es proporcionar una presentación pedagógica de como se puede estudiar el comportamiento crítico del modelo de Ising utilizando el método de Monte Carlo. El modelo de Ising, ha sido ampliamente estudiado y se tienen resultados exactos para los casos unidimensional con y sin campo magnético externo y bidimensional en ausencia de campo magnético externo. Sin embargo, el modelo tridimensional no ha sido resuelto hasta la fecha, ni aun en ausencia de campo magnético externo.

Para lograr nuestro objetivo se implementó un programa en una microcomputadora, por medio del cual se simula el modelo de Ising utilizando la técnica del método de Monte Carlo y se calculan algunas de sus propiedades termodinámicas. El programa está implementado en una microcomputadora personal compatible con el sistema IBM-PC de 16 bits con 512 K de memoria residente. Dicho programa está basado en un programa, diseñado por S. E. Koonin, que forma parte del libro *Computational Physics* [Koonin, 1985]. El trabajo que se realizó consistió en darle flexibilidad al programa con el propósito de que se puedan simular otros modelos. Para esto, el programa original, implementado en BASIC y diseñado para simular el modelo de Ising en los casos ferro y antiferromagnético, se tradujo a PASCAL, incorporando los cambios pertinentes para realizar la simulación de otros modelos tales como un modelo bidimensional que presenta anisotropía en el espacio real y un modelo que presenta frustración. El trabajo está estructurado de la siguiente manera:

En el Capítulo 1 se da una breve presentación de la fenomenología de las transiciones de fase y fenómenos críticos y del lenguaje que se usa para describirlos. En el Capítulo 2 nos concentramos en dar una descripción somera de los fenómenos magnéticos y su origen, así como una descripción del modelo de Ising.

El Capítulo 3 esta dedicado a la presentación del método de Monte Carlo y de su uso dentro de la mecánica estadística para calcular promedios de las observables de un sistema. El Capítulo 4 contiene una descripción del programa que se implementó e incluye además el propio programa.

Finalmente en el Capítulo 5 se exponen los resultados obtenidos en cada uno de los casos estudiados: ferromagnetismo con y sin campo magnético externo; antiferromagnetismo sin campo magnético externo; ferromagnetismo anisotrópico (en el espacio real) sin campo magnético externo, y por último un sistema muy pequeño en el que se observa el fenómeno de frustración.

Cabe mencionar que aparte de los resultados numéricos que se obtienen con el programa, es posible también entender a través de este, algunos aspectos de la fenomenología de las transiciones de fase y de los fenómenos críticos, y que por lo tanto sería de gran utilidad en la enseñanza de la mecánica estadística, tanto a nivel de licenciatura como a nivel posgrado y de la educación media superior.

Capítulo 1 . Introducción a los fenómenos críticos.

1.1 Termodinámica de las Transiciones de Fase. :

Importantes tanto desde el punto de vista teórico como experimental las transiciones de fase se han estudiado desde hace mucho tiempo. Los primeros trabajos sobre transiciones de fase se llevaron a cabo alrededor de 1870 [Sengers, 1979] principalmente por Andrews [Andrews, 1869] y van der Waals [van der Waals, 1873] quienes hicieron posible el surgimiento de la llamada teoría clásica de van der Waals de las transiciones de fase líquido-gas.

La principal contribución del trabajo de Andrews es el establecimiento de que los componentes de las fase líquida y gaseosa de un fluido son indistinguibles, es decir que no están formadas por partículas diferentes (gaseones y liquidones, como hasta entonces se pensaba). Por su parte van de Waals estableció que la condensación y el comportamiento crítico de un fluido pueden entenderse sobre la base de una suposición sencilla sobre las interacciones entre las moléculas, a saber la existencia una coraza repulsiva y una energía de atracción entre las partículas dependiente de la densidad.

Años mas tarde surgieron otras teorías, de las denominadas clásicas, como la teoría de Curie-Weiss (1948) de las transiciones de fase magnéticas y la teoría de Landau (1937) de las transiciones de fase de segundo orden, en la cual por primera vez se intentó dar una descripción unificada de todas las transiciones de fase de segundo

orden. A partir de entonces se ha dado un desarrollo sistemático en el área y es en los últimos años que se han consolidado teorías completas que han permitido el entendimiento de estos fenómenos con relativo éxito.

El presente capítulo tiene como objetivo presentar la fenomenología y características principales de las transiciones de fase, así como el lenguaje que se utiliza para su estudio, prestando especial atención a la región crítica de éstas. Se plantean además algunas de las teorías antes mencionadas.

Las sustancias en la naturaleza se encuentran en una gran variedad de estados, cada uno de los cuales está caracterizado por los valores de un conjunto de variables termodinámicas como temperatura, presión, campo magnético, etc. Cada estado presenta ciertas propiedades macroscópicas que se conservan al evolucionar las variables termodinámicas en intervalos definidos, pero existen intervalos muy estrechos de estas variables en los que el sistema cambia notablemente sus propiedades, se dice entonces que el sistema sufre una transición de fase. Los fluidos clásicos proporcionan los ejemplos más familiares de transiciones de fase con sus transiciones líquido-gas, sólido-gas y sólido-líquido, aunque hay una gran variedad de transiciones de fase como son ferromagnéticas, ferroeléctricas, orden-desorden, etc.

Para empezar a entender las transiciones de fase lo más conveniente es analizar el diagrama de fases del sistema. Con el propósito de introducir algunas ideas consideraremos tres diagramas de fase particulares.

El primero (Figura 1.1) es el diagrama Presión - Temperatura de un

fluido, que muestra los dominios en donde existen las diferentes fases. En el diagrama, además de las líneas que definen los dominios, se observan dos puntos muy importantes que son el punto triple, (donde coexisten las tres fases), y el llamado punto crítico que es el punto final de la línea de la interfase líquido-gas. El hecho de que esta curva termine en un punto y no se continúe infinitamente significa que podemos convertir líquido en gas continuamente sin cruzar la línea de transición, como se indica con la línea punteada. En la próxima sección daremos una caracterización más detallada del punto crítico.

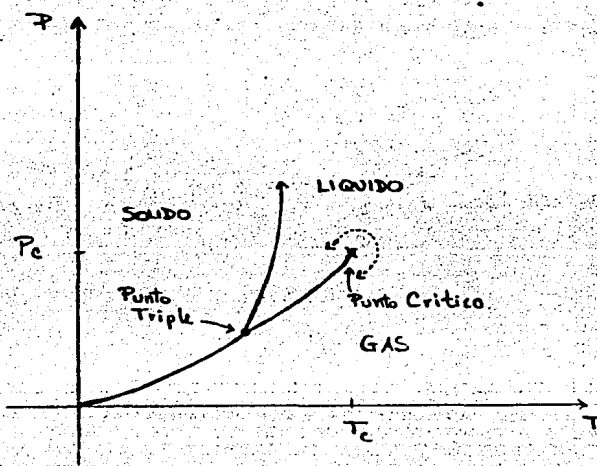


Figura 1.1 Diagrama Presión-Temperatura de un fluido.

El segundo (Figura 1.2) es un diagrama Campo Magnético-Temperatura de un ferromagneto, en el se observa una región en el eje horizontal que termina en un punto llamado crítico (igual que en el caso anterior). A altas temperaturas se observa una fase desordenada, que no exhibe magnetización espontánea; cuando se disminuye la temperatura ocurre una transición de fase en el punto crítico $T=T_c$, y para $T < T_c$ se

observa una fase ordenada que presenta magnetización espontánea. En la Figura 1.2, al cruzar la región $H=0$, $0 < T < T_c$ (es decir, al pasar de $H < 0$ a $H > 0$ con $T < T_c$) la magnetización cambia discontinuamente, ésta discontinuidad decrece a medida que nos acercamos al punto crítico y finalmente desaparece en el punto crítico.

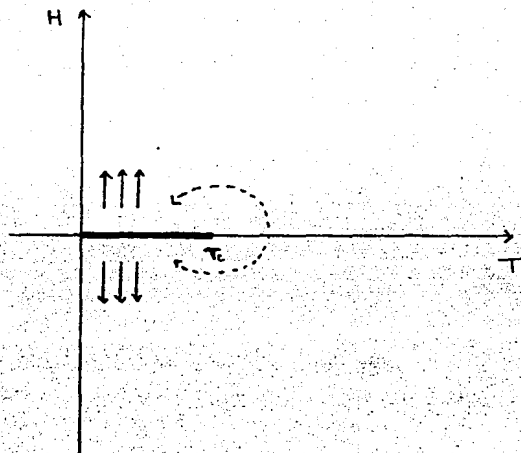


Figura 1.2 Diagrama Campo Magnético-Temperatura de un Ferromagneto.

El tercer diagrama (Figura 1.3) es también un diagrama Campo Magnético-Temperatura pero en este caso de un antiferromagneto. En el diagrama se notan dos dominios separados por una línea en la que sólo una parte es continua y la otra es punteada. Al cruzar la parte continua, se observa una discontinuidad en la magnitud de la magnetización alternante del sistema. Esta discontinuidad no se observa al cruzar la parte punteada de la línea, por lo que se dice que esta parte de la línea es una línea de puntos críticos (por que no hay discontinuidad). Al punto terminal de la línea de puntos críticos se le

llama punto tricrítico.

En el punto de transición dos (o más) fases pueden coexistir en equilibrio termodinámico, el número de estas está dado por la regla de las fases de Gibbs, que nos dice que en un sistema formado por k tipos de partículas pueden coexistir a lo más $(k+2)$ fases.

Las transiciones de fase pueden darse bruscamente como en el caso de la transición líquido-sólido o suavemente como en el caso de la transición orden - desorden en un ferromagneto.

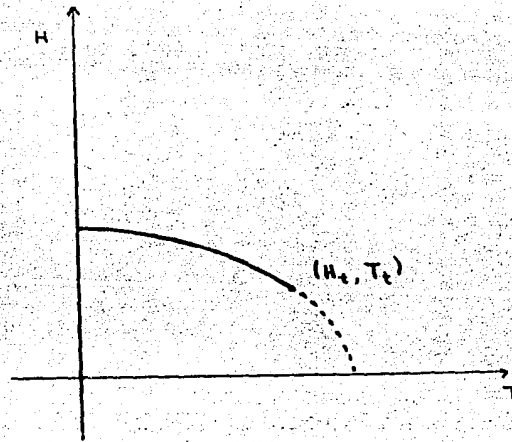


Figura 1.3 Diagrama Campo Magnético - Temperatura de un Antiferromagneto.

1.2 Clasificación de las Transiciones de Fase. Punto crítico.

Cuando ocurre una transición de fase, el potencial de Helmholtz cambia continuamente, pero sus derivadas pueden ser continuas o discontinuas. Esta diversidad de comportamientos se observa debido a

que en el potencial de Helmholtz $F=U-TS$, a una temperatura fija T , existe una competencia entre la energía U (que favorece el orden) y la entropía S (que favorece el desorden).

La diferente naturaleza de las transiciones hace necesario clasificarlas. Dos clasificaciones que se utilizan actualmente son la de Ehrenfest y la de Landau, el propósito de ambas es describir la brusquedad con que se da la transición. En términos del potencial de Gibbs la clasificación de Ehrenfest nos dice que una transición es de primer orden o discontinua si la primera derivada del potencial es discontinua y es de segundo orden si ésta derivada es continua, pero alguna de las derivadas de orden superior es discontinua.

La clasificación de Landau consiste en distinguir una fase de otra definiendo un parámetro de orden que tiene un valor diferente de cero en la fase ordenada y es cero en la fase desordenada. En general un valor diferente de cero del parámetro de orden corresponde al rompimiento de una simetría. En el caso ferromagnético la simetría que se destruye es la simetría bajo rotaciones, ya que por ejemplo un ferromagneto tridimensional en la fase desordenada es invariante ante rotaciones alrededor de sus tres ejes y en la fase ordenada solo es invariante ante rotaciones alrededor del eje que coincide con la dirección de la magnetización.

En términos del parámetro de orden la clasificación de Landau nos dice que si éste tiene una discontinuidad en la transición, entonces la transición es de primer orden. Donde no hay tal discontinuidad se dice que la transición es de segundo orden. En las Figuras 1.1 y 1.2 las líneas de transición son líneas de transiciones de primer orden, mientras que en los puntos críticos las transiciones son de segundo

orden. En la Figura 1.3 la línea de transición tiene un segmento de transiciones de segundo orden (la línea de puntos críticos) y otro de transiciones de primer orden (línea continua).

Cuando se construye una gráfica del parámetro de orden p contra la Temperatura típicamente se obtiene una curva como la que se muestra en la Figura 1.4, en donde se observa que no hay discontinuidades en el parámetro de orden mismo, pero si en su pendiente.

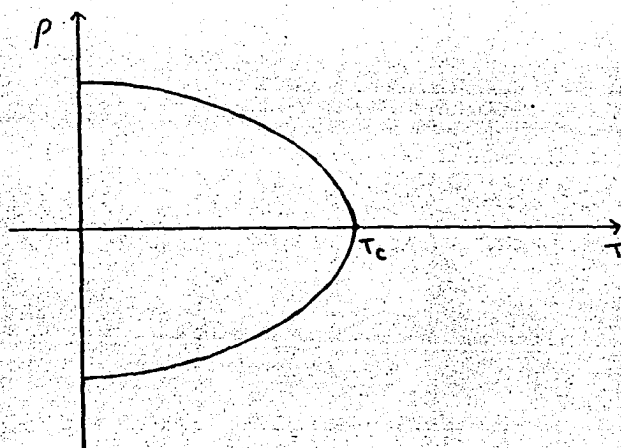


Figura 1.4 Parámetro de orden p como función de la temperatura T .

El punto crítico juega un papel fundamental en la teoría de las transiciones de fase, por lo que es muy importante estudiar detenidamente las características del sistema a nivel microscópico. Podemos aquí mencionar algunos de los aspectos más importantes.

En la vecindad del punto de transición el sistema tiene dos fases diferentes, estables cada una, con energías muy próximas. Bajo estas condiciones las fluctuaciones en la energía gobiernan el comportamiento del sistema cerca de la transición.

Consideremos por ejemplo un sistema ferromagnético, cuyo diagrama de fases es el de la Figura 1.2. Para $T > T_c$ la fase estable es la fase desordenada, sin embargo cuando T se acerca a T_c la fase ordenada es solo ligeramente menos estable, las fluctuaciones térmicas permiten que el sistema alcance la fase ordenada provocando entonces la aparición de regiones localmente ordenadas. Definimos para las fluctuaciones en la densidad de magnetización una longitud de correlación ξ que mida su extensión media. Esta longitud ξ crecerá entonces a medida que nos aproximemos al punto crítico. En el punto crítico las fluctuaciones se vuelven cada vez más importantes, encontrándose [Toulouse, 1977] que $\xi \rightarrow \infty$ cuando $T \rightarrow T_c$.

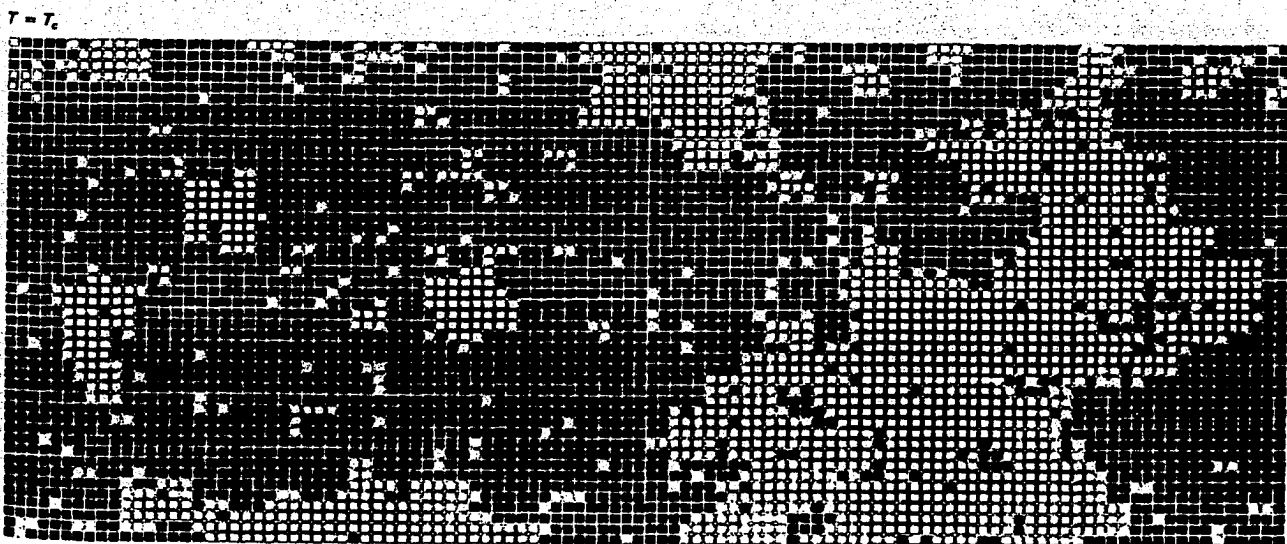


Figura 1.5 Imágen de un ferromagneto en $T=T_c$.

Lo anterior se puede aprovechar para construir una imagen del sistema en el punto crítico. La divergencia en la longitud de correlación implica que en el sistema existen correlaciones entre los

espines a todas las distancias y por consiguiente se presentarán fluctuaciones en la magnetización a todas las escalas. Dado que la susceptibilidad magnetica es la suma de estas fluctuaciones, en el punto crítico presentará una divergencia. De acuerdo con esta descripción el sistema estará formado por dominios (de espines positivos o negativos), que a su vez contienen otros dominios y así hasta llegar a dominios de un elemento. La imagen típica de un ferromagneto en el punto crítico se muestra en la Figura 1.5.

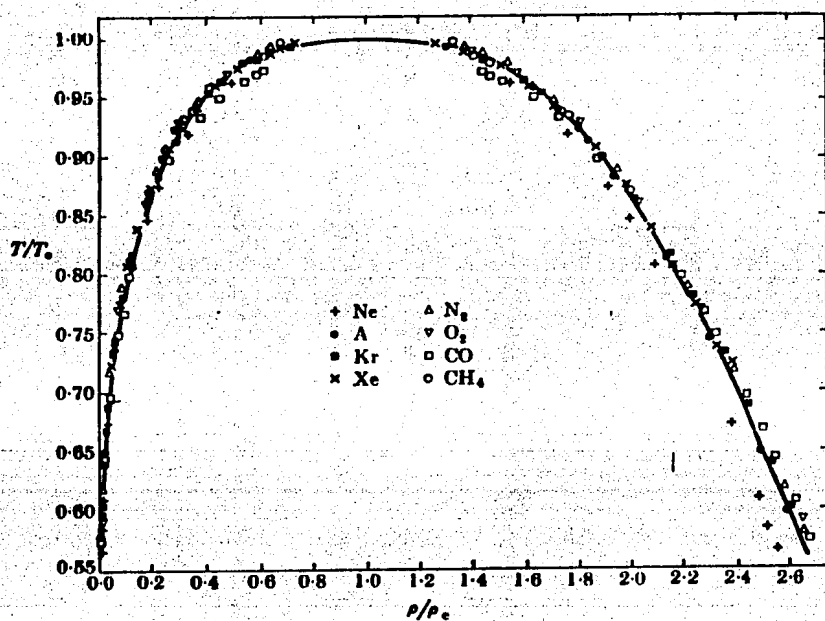


Figura 1.6 Diagrama $T/T_c - \rho/\rho_c$ de diferentes sustancias [Guggenheim].

Ahora bien, aunque los puntos críticos aparecen en una gran variedad de sistemas, se ha encontrado que para un gran número de ellos existe una sorprendente similitud en su comportamiento termodinámico a medida que se aproximan a su punto crítico, cuando las variables

involucradas se escalan apropiadamente. Un ejemplo de esta similitud lo constituye el ya clásico diagrama de Guggenheim (Figura 1.6) [Guggenheim, 1945], en donde se muestra la dependencia de T/T_c con p/p_c , observándose que para ocho gases diferentes los datos caen sobre la misma curva, cuya ecuación se conoce como Ley de Estados Correspondientes.

En la siguiente sección se expondrá brevemente lo que se considera una de las mejores caracterizaciones del comportamiento de un sistema en el entorno del punto crítico, a saber los exponentes críticos.

1.3 Exponentes Críticos.

En las proximidades del punto crítico las funciones termodinámicas pueden exhibir varios comportamientos, es decir pueden ser divergentes, discontinuas, hacerse cero o bien permanecer finitas. Al introducir el parámetro:

$$\epsilon = (T - T_c) / T_c, \quad (1.1)$$

donde T es la temperatura y T_c la temperatura crítica, cerca del punto crítico ($\epsilon \rightarrow 0$) todas las funciones termodinámicas se pueden desarrollar en la forma:

$$F(\epsilon) = A\epsilon^\lambda (1 + B\epsilon^\nu + \dots), \quad (1.2)$$

con $\nu > 0$.

El exponente crítico correspondiente al punto crítico $\epsilon = 0$ de la función $F(\epsilon)$ se define entonces como

$$\lambda = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \ln F(\epsilon) / \ln \epsilon, \quad (1.3)$$

si el límite existe.

El comportamiento de la función en la vecindad de $\epsilon = 0$ depende fundamentalmente del valor de λ , por ejemplo si $\lambda < 0$, $F(\epsilon)$ diverge en el punto crítico, si $\lambda > 0$ la función se hace cero y si $\lambda = 0$ se tienen varios posibles comportamientos, por ejemplo puede corresponder a una divergencia logarítmica :

$$F(\epsilon) = A \ln(\epsilon) + B, \quad (1.4)$$

a una dependencia en ϵ de la forma:

$$F(\epsilon) = A + B |\epsilon|^{\frac{1}{2}}, \quad (1.5)$$

o bien a una discontinuidad.

A lo largo de esta discusión el parámetro de expansión ϵ se ha elegido con relación a la temperatura, pero pueden introducirse otros parámetros que dependan por ejemplo de la presión, el volumen, el campo magnético externo, etc. y definir en forma análoga sus respectivos exponentes críticos. En las tablas 1.1 y 1.2 se definen los exponentes críticos más usados, relativos a ϵ , para dos tipos de sistemas: fluidos y sistemas magnéticos.

1.4 Métodos de Solución.

Como mencionamos en la sección 1.1, las primeras teorías que surgen en el estudio de los fenómenos críticos y transiciones de fase son las llamadas teorías de Campo Medio y a este grupo pertenecen la teoría de van der Waals, la teoría de Ginzburg-Landau, la teoría de Curie-Weiss, etc.

El nombre de teorías de Campo Medio se debe a que pueden derivarse

suponiendo que cada partícula interacciona con un campo promedio producido por las demás. En la mayoría de los casos estudiados las teorías pertenecientes a este grupo predicen correctamente el comportamiento cualitativo del sistema, sin embargo no proporcionan los valores correctos de los exponentes críticos ni de la temperatura crítica, debido a que no toman en cuenta correctamente las correlaciones de corto alcance que son especialmente importantes en el punto crítico.

TABLA Nº 1.1

Definiciones de exponentes críticos para un fluido.

Exponente	Definición	Condiciones			Cantidad que caracteriza.
		ϵ	$P-P_c$	$\rho-\rho_c$	
α'	$C_v \sim (-\epsilon)^{-\alpha'}$	<0	$=0$	$=0$	Calor específico a volumen constante.
α	$C_v \sim (\epsilon)^{-\alpha}$	>0	$=0$	$=0$	Calor específico a volumen constante.
β	$\rho - \rho_c \sim (-\epsilon)^\beta$	<0	$=0$	$\neq 0$	Grado de la curva de co-existencia.
γ'	$K \sim (-\epsilon)^{-\gamma'}$	<0	$=0$	$\neq 0$	Compresibilidad isotérmica.
γ	$K \sim (\epsilon)^{-\gamma}$	>0	$=0$	$=0$	Compresibilidad isotérmica.
δ	$P-P_c \sim \rho - \rho_c ^\delta$ $\text{sgn}(\rho - \rho_c)$	>0	$\neq 0$	$\neq 0$	Grado de la isoterma crítica.

TABLA Nº 1.2

Definiciones de exponentes críticos para un magneto.

Exponente	Definición	Condiciones			Cantidad que caracteriza.
		ϵ	H	M	
α'	$C \sim (-\epsilon)^{-\alpha'}$	<0	$=0$	$=0$	Calor específico a campo constante.
α	$C \sim (\epsilon)^{-\alpha}$	>0	$=0$	$=0$	Calor específico a campo constante.
β	$M \sim (-\epsilon)^{\beta}$	<0	$=0$	$\neq 0$	Magnetización a campo cero.
γ'	$\chi \sim (-\epsilon)^{-\gamma'}$	<0	$=0$	$\neq 0$	Susceptibilidad magnética a campo cero.
γ	$\chi \sim (\epsilon)^{-\gamma}$	>0	$=0$	$=0$	Susceptibilidad magnética a campo cero.
δ	$H \sim M ^{\delta} \text{sgn}(M)$	$=0$	$\neq 0$	$\neq 0$	Grado de la isoterma crítica.

Como se mencionó anteriormente una característica muy importante de los sistemas en el punto crítico es la existencia de correlaciones a todas las escalas. Esta multiplicidad de escalas complica notablemente de descripción de sistema así como su solución. Son muy pocas las soluciones exactas para este tipo de sistemas y en muchos casos aún las

mejores aproximaciones son poco satisfactorias. En la década pasada se introdujo un nuevo método, llamado grupo de renormalización, para tratar el tipo de problemas en donde son importantes muchas escalas de longitud.

El grupo de renormalización no es una teoría descriptiva de la naturaleza, sino más bien un método general para construir teorías. Puede aplicarse no solo a un fluido, sino a un material ferromagnético, una aleación, etc., todos ellos en su punto crítico. Otra clase de problemas a los que puede aplicarse son [Wilson] flujos turbulentos, polímeros, los enlaces entre quarks, etc.. De hecho muchas de las ideas y técnicas utilizadas en el grupo de renormalización tienen su origen en las teorías cuánticas de campo.

Un hecho que parece ser confirmado por el grupo de renormalización es el que mencionamos en la sección 1.2 acerca de que algunos sistemas que superficialmente parecen ser distintos pertenecen a clases de equivalencia muy generales a un nivel más profundo. El comportamiento crítico de fluidos, ferromagnetos, aleaciones, mezclas líquidas, etc., puede ser descrito por un solo modelo.

En los últimos años un método de cálculo que ha recibido mucha atención es el Método de Monte Carlo, por medio del cual se pueden simular numéricamente las propiedades del sistema. Los resultados que se obtienen son precisos; los errores estadísticos que se generan se pueden hacer tan pequeños como se quiera si se invierte suficiente tiempo de máquina. El Capítulo 3 está dedicado a la descripción de este método.

De las soluciones exactas que se mencionan, la más conocida es la solución de Onsager al Modelo de Ising bidimensional en ausencia de

campo magnético. El Capítulo 2 está dedicado a dicho modelo, debido al hecho de que es este modelo uno de los más sencillos que permite estudiar las transiciones de fase y en particular el comportamiento crítico.

El modelo de Ising originalmente creado para explicar algunos aspectos del magnetismo, actualmente tiene aplicaciones en diversos problemas de la física estadística como mezclas binarias, aleaciones, gases en redes, emulsiones, etc.

Capítulo 2. Magnetismo y el Modelo de Ising.

2.1 Magnetismo (Ferro y antiferromagnetismo).

En esta sección se expondrán brevemente los aspectos más importantes de los fenómenos ferro- y antiferro-magnético con el fin de familiarizarnos con ellos, y en la sección 2.2 nos referiremos al modelo de Ising propiamente dicho.

A la fecha los diferentes tipos de magnetismo que se han observado son alrededor de catorce [Hurd, 1892], que pueden dividirse en dos grandes grupos, aquellos que son de tipo no cooperativo y los de tipo cooperativo, los primeros son aquellos en donde no hay interacción entre los espines magnéticos, y los de tipo cooperativo, en los que las interacciones entre los espines son intrínsecamente importantes. Ambos fenómenos el ferro- y el antiferromagnetismo son fenómenos cooperativos puesto que se deben a las interacciones entre los momentos magnéticos atómicos.

La interacción entre los momentos magnéticos no es precisamente la interacción magnética dipolo-dipolo, ya que esta interacción es, en general, demasiado pequeña [Reif, 1965] como para producir por ejemplo ferromagnetismo. La interacción predominante es la usualmente llamada interacción de intercambio, la cual es una manifestación del principio de exclusión de Pauli. Como los electrones no pueden ocupar el mismo estado, dos electrones de átomos muy próximos con momento magnético paralelo no pueden estar muy próximos entre sí en el espacio; por otra parte si los electrones tienen

momentos magnéticos antiparalelos, ya están en estados diferentes y por lo tanto no existe restricción del principio de exclusión sobre cuanto puedan aproximarse entre sí. Ahora bien dado que separaciones espaciales diferentes de los electrones dan lugar a interacciones electrostáticas diferentes entre ellos, este estudio cualitativo demuestra que la interacción electrostática (que puede ser del orden de 1 eV, y por lo tanto mayor que cualquier interacción magnética) entre dos átomos próximos depende también de las orientaciones relativas de los espines. Este es el origen de la interacción de intercambio que, como lo demostró Heisenberg en 1928[Gopal, 1976], para dos átomos j y k esta dada por:

$$H = -2J \hat{S}_j \cdot \hat{S}_k, \quad (2.1)$$

donde \hat{S}_i es el operador de espín del i -ésimo átomo y J es un parámetro (dependiente de la separación entre los átomos), que mide la intensidad de la interacción de intercambio.

Si $J > 0$, la energía de interacción es más pequeña cuando los momentos magnéticos son paralelos que cuando son antiparalelos. Cuando $J < 0$ se tiene la situación inversa. Por lo tanto si $J > 0$ ($J < 0$) el estado de mínima energía será el que favorezca la orientación paralela (antiparalela) de los momentos magnéticos, esto es, aquel que tienda a producir ferromagnetismo (antiferromagnetismo). Observe que como la interacción de intercambio depende del grado de traslape que puedan alcanzar las funciones de onda de los electrones de los dos átomos, para ocupar aproximadamente la misma región del espacio, J cae rápidamente con el incremento de la separación entre los átomos; en consecuencia la interacción de intercambio es despreciable excepto cuando los átomos están lo suficientemente próximos unos de

otros. Así pues, cada átomo tendrá interacciones apreciables únicamente con los átomos más próximos a él.

La mecánica estadística de partículas con interacciones entre vecinos cercanos de la forma $-2J\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j$ es muy complicada, debido al comportamiento cooperativo que presentan. Por este motivo han surgido aproximaciones al modelo de Heisenberg tales como el modelo de Weiss o el modelo de Ising. En este último solo se conserva el término $-2JS_j S_k$ como término dominante de la interacción de intercambio de tal manera que se obtiene el hamiltoniano:

$$H = -2JS_j S_k, \quad (2.2)$$

donde S_j es la proyección del operador de espín \hat{S}_j sobre el eje z.

Aunque el modelo de Ising no proporciona una descripción adecuada del ordenamiento magnético a bajas temperaturas, es interesante su estudio, ya que en la vecindad de la temperatura de transición los resultados que se obtienen son bastante aceptables [Gopal, 1976]. El resto del capítulo está dedicado a la descripción de este modelo.

2.2 Modelo de Ising. Definición e historia.

El número de modelos que se han estudiado con el fin de obtener información acerca de la naturaleza de las transiciones de fase es muy grande. En los últimos años se ha logrado avanzar considerablemente en el entendimiento de las transiciones de fase magnéticas, y en general de las transiciones de fase, al trabajar con un modelo muy particular, el modelo de Ising.

Este pertenece a la clase de modelos en redes, entre los cuales se encuentran también el modelo de Potts, el modelo Esférico, el modelo Gaussiano, el modelo X-Y, modelos $O(n)$, Z_n , etc. En esta clase los sistemas se modelan como una red con una base de microsistemas en los sitios de la red, dichos microsistemas pueden tener un número discreto o continuo de estados y habrá una cierta interacción definida entre los sitios.

La ventaja de este tipo de modelos radica en que el discretizar el espacio físico facilita diversos tipos de interacciones y por otra parte que en algunos casos - como en cristales - se apegan considerablemente al sistema real.

El modelo de Ising ha sido estudiado en diversos tipos de redes, en su versión original se asocian dos estados a cada uno de los microsistemas y se establece una interacción a primeros vecinos. Los microsistemas son en este caso átomos cuyos espines, que denotamos por S_i , solo pueden apuntar hacia arriba y hacia abajo, tomando los valores ± 1 . En una red cuadrada el modelo se ilustra en la Figura 2.1.

Cuando se trabaja con el modelo bidimensional, es conveniente identificar a los espines S_i a través de dos índices que indiquen su localización en la red. Si en ésta hay un total de $N=N_x \cdot N_y$ sitios, es decir N_x en la dirección horizontal y N_y en la dirección vertical, entonces el modelo tiene 2^N posibles configuraciones, cada una de las cuales esta determinada por el conjunto:

$$\{S_i\} = \{ S_{11}, S_{12}, \dots, S_{1N_x}, \dots, S_{N_y1}, S_{N_y2}, \dots, S_{N_x N_y} \}, \quad (2.3)$$

donde $S_{ij} = \pm 1$.

El Hamiltoniano del modelo en red cuadrada está dado por:

$$H = -J \left(\sum_i \sum_j S_{i,j} S_{i+1,j} + \sum_i \sum_j S_{i,j} S_{i,j+1} \right) - h \sum_i S_{i,j}, \quad (2.4)$$

donde J es la constante de interacción entre dos espines y h es un campo magnético externo.

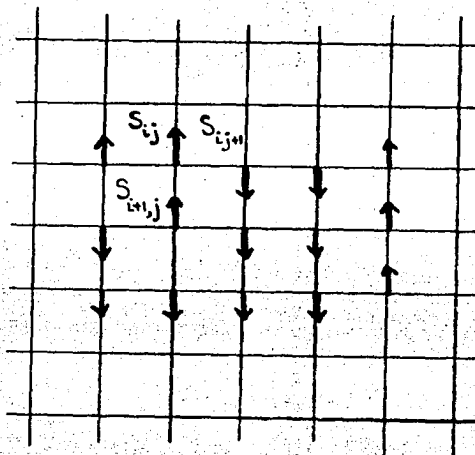


Figura 2.1 Modelo de Ising en red cuadrada.

El modelo nace en 1920, como una idea de Wilhem Lenz, [Brush, 1967] para explicar algunos aspectos del fenómeno del magnetismo, que se concían experimentalmete. En 1925 Edwin Ising se dedicó a estudiar las propiedades del modelo en el caso unidimensional; Ising logró resolver completamente el problema, es decir, evaluó la función de partición definida por:

$$Z_N(T) = \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta H\{S_i\}), \quad (2.5)$$

donde $\beta = 1/K_b T$, K_b es la constante de Boltzmann, T la temperatura, N el número de sitios en la red y $H\{S_i\}$ es el Hamiltoniano del sistema dado por la ecuación (2.4).

En su solución Ising encontró que el modelo unidimensional no exhibe una transición de fase para $T > 0$, e incluso argumentó que lo mismo sucedería en los casos bi- y tri-dimensional. Esto causó en cierta medida decepción debido a que el modelo semiclásico de Lenz era incapaz de explicar los aspectos básicos del ferromagnetismo, en consecuencia el interés por este decayó.

Años más tarde el estudio de lo que en adelante se conocería como modelo de Ising renació debido al desarrollo de la física de aleaciones más que por un interés directo. Algunos de los primeros trabajos provienen de Bragg y Williams [Bragg y Williams, 1934,1935], Bethe [Bethe, 1935] y Peierls [Peierls, 1936a,1936b]. El primer resultado para el problema bidimensional lo obtuvo Peierls (1936b), quien dió un argumento por el que a temperaturas suficientemente bajas debería existir una magnetización espontánea diferente de cero, es decir debería existir una transición de fase.

Una contribución importante proviene de Kramers y Wannier [Kramers y Wannier, 1941], quienes formularon el problema en términos de matrices y por consideraciones de simetría lograron localizar exactamente el punto crítico del sistema en el caso bidimensional en ausencia de campo magnético externo. Una evaluación exacta de la función de partición se obtuvo hasta 1944 con el trabajo de Lars Onsager [Onsager 1944]. En la próxima sección daremos los principales resultados de la solución de Onsager.

2.3 La solución de Onsager al modelo bidimensional.

En 1944 Onsager mediante la aplicación del álgebra de Lie y de representaciones de grupo logró resolver exactamente el modelo de Ising bidimensional en red cuadrada en ausencia de campo magnético externo, cuyo Hamiltoniano está dado por la ecuación (2.4). Para una derivación de este resultado ver por ejemplo [Thompson, 1972].

Con su solución Onsager encontró que el modelo de Ising bidimensional en ausencia de campo magnético externo sufre una transición de fase de segundo orden en una temperatura finita T_c dada por:

$$K_b T_c / J = 2.26918 \dots \quad (2.6)$$

Algunos de los exponentes críticos que se obtienen con la solución de Onsager son (para su definición ver la TABLA Nº 1.2 del Capítulo 1):

$$\begin{aligned} \alpha = \alpha' &= 0 \log, & \beta &= 1/8, \\ \gamma = \gamma' &= 7/4 & \delta &= 15. \end{aligned} \quad (2.7)$$

En las Figuras (2.2) y (2.3) se muestra el comportamiento de algunas de las principales observables del modelo de Ising, según la solución de Onsager. Las observables que se muestran son magnetización, y capacidad calorífica a campo magnético cero. De estas Figuras se puede ver que la capacidad calorífica tiene un comportamiento singular en la temperatura $T=T_c$ y que la magnetización muestra el comportamiento típico de un parámetro de orden (Figura 1.4).

A partir de la solución de Onsager el desarrollo del área de transiciones de fase y fenómenos críticos sufrió cambios apreciables

debido a que esta solución constituyó la primera demostración de que la función de partición de un modelo o sistema contiene toda la información referente a éste incluyendo la existencia de transiciones de fase.

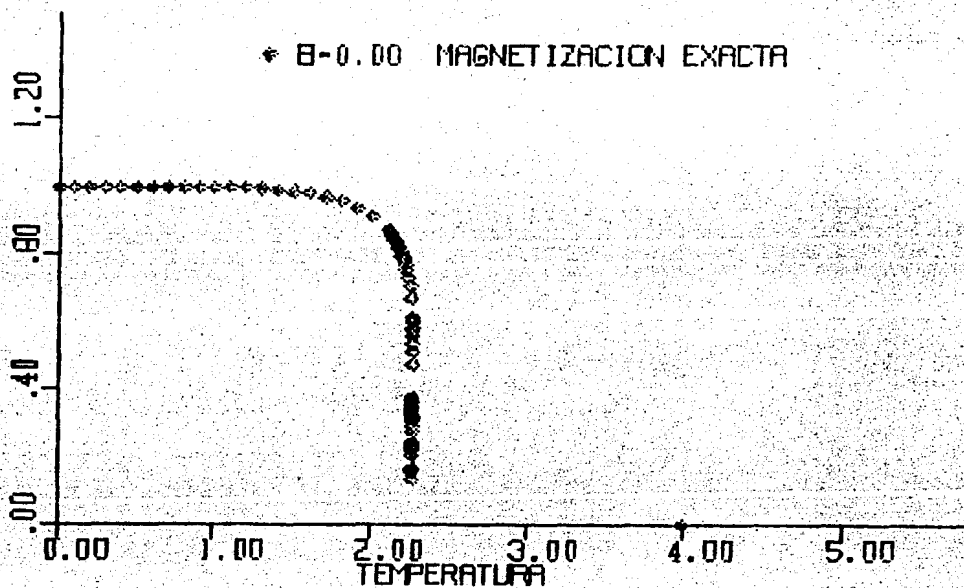


Figura 2.2 Magnetización del modelo de Ising bidimensional en ausencia de Campo Magnético.

Debido a la importancia del resultado de Onsager, el modelo de Ising y en general los modelos en redes han recibido mucha atención, sobre todo porque muchos problemas se vuelven tratables bajo este esquema: ferromagnetos, polímeros, emulsiones, aleaciones, mezclas de fluidos,

etc.

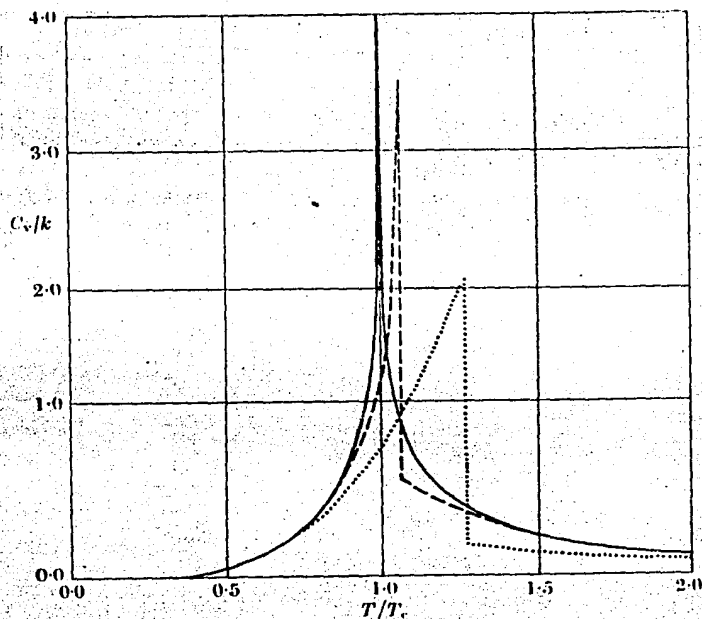


Figura 2.3 Capacidad calorífica del modelo de Ising bidimensional según la solución de Onsager (—), según la aproximación de Kikuchi (- - -) y según la aproximación de Kramers y Wannier (· · · ·).

2.4 Generalizaciones del modelo de Ising.

Algunos de los modelos que están relacionados con el modelo de Ising son aquellos en los que:

- 1.-Las interacciones no son uniformes, es decir la constante de interacción depende de los sitios i y j , por lo que el Hamiltoniano del sistema se puede escribir como:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j, \quad (2.8)$$

donde como antes los espines solo interactúan con sus vecinos más cercanos y el símbolo $\langle i,j \rangle$ indica que la suma se realiza sobre los pares de espines que son vecinos cercanos. Un ejemplo sencillo que se encuentra en un modelo bidimensional es aquél en el que hay una constante de interacción J_v entre los espines a lo largo de las columnas y otra J_h a lo largo de los renglones, de tal manera que el Hamiltoniano es:

$$H = -J_v \sum S_{i,j} S_{i+1,j} - J_h \sum S_{i,j} S_{i,j+1}. \quad (2.9)$$

Bajo estas condiciones se dice que el sistema es anisotrópico en el espacio físico.

2.-Las interacciones se extienden a más vecinos, es decir el Hamiltoniano será:

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j, \quad (2.9)$$

lo cual permite en ocasiones hacer más realista al modelo.

3.-Las interacciones son anisotrópicas en el espacio interno de los espines y a vecinos cercanos, es decir el Hamiltoniano del sistema se convierte en:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{n=1}^D J_n S_{in} S_{jn}, \quad (2.10)$$

donde D es la dimensión de espacio en el que se encuentran los espines. Claramente este caso se reduce al caso isotrópico cuando $J=J_n$ para $n=1,2,\dots,D$.

Otros modelos en redes que es interesante estudiar y que guardan cierta similitud con el modelo de Ising son aquellos que presentan frustración y/o desorden.

Un modelo que presenta frustración es aquél que no siendo capaz de alcanzar un estado de mínima energía que satisfaga enteramente sus constricciones microscópicas, posee varios estados igualmente frustrados. Es decir un modelo frustrado no tiene una única configuración para su estado base, y como resultado de ello muestra metaestabilidad, efectos de histéresis, etc.

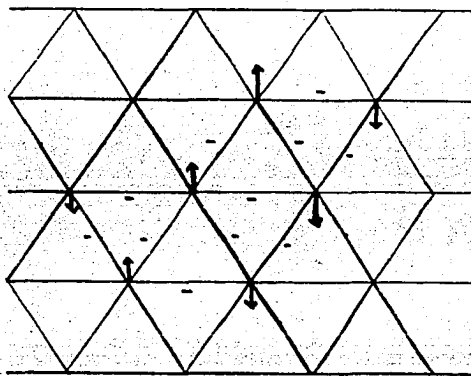


Figura 2.4 Antiferromagneto en red triangular.

El modelo mas sencillo que presenta frustración es un antiferromagneto en red triangular (Figura 2.4). Consideremos un triángulo elemental o plaqueta de la red, mediante una rápida inspección es fácil convencerse de que dada cualquier configuración, cada plaqueta tendrá al menos un par de espines que no estan en su estado de mínima energía, lo cual según lo expuesto en el parrafo anterior, significa que el

modelo presenta el fenómeno de frustración.

Existen otros modelos que presentan frustración, en los que también aparece el desorden. Existen varias clasificaciones de los diferentes tipos de desorden, que dependen del área en que se trabaje. Dentro del contexto de este trabajo es conveniente dividir a los sistemas desordenados en varios grupos dependiendo de si el desorden se debe a la presencia de campos aleatorios, constantes de interacción aleatorias o anisotropías aleatorias [Hertz, 1985]. En lo que resta de este capítulo solo nos ocuparemos del caso en que aparecen constantes de interacción aleatorias.

Es posible además hacer clasificaciones más finas al especificar si el desorden es débil o fuerte y cual es la función de distribución de la variable que provoca el desorden. Un modelo ligeramente desordenado es aquél en el que el desorden no provoca la aparición de nuevos puntos críticos o nuevas fases, mientras que uno fuertemente desordenado es aquel en el que si aparecen nuevas fases.

Una situación de desorden débil producido por constantes de interacción aleatorias puede obtenerse a través de la aleación de dos substancias con temperaturas críticas diferentes, la introducción de impurezas no magnéticas en un material magnético, etc.

Un vidrio de espín es un ejemplo de un ferromagneto fuertemente desordenado, donde el desorden esta provocado por interacciones aleatorias, aunque estrictamente hablando son los signos de estas constantes de interacción los que tienen un carácter aleatorio más que las interacciones mismas. Típicamente en un vidrio de espín 50% de las interacciones son ferromagnéticas y el otro 50% son antiferromagnéticas. Esto se manifiesta en que el modelo no presenta

una condensación, ya sea ferromagnética o antiferromagnética, a bajas temperaturas, sino que parece quedar congelado en una configuración en donde los espines están orientados al azar, como se muestra en la Figura 2.6, apareciendo plaquetas frustradas.

Un vidrio de espín está caracterizado precisamente por esta fase de baja temperatura, en la que el tiempo de relajación hacia el equilibrio es muy largo (como se observa en los vidrios reales). Esta característica puede relacionarse con la imposibilidad práctica de encontrar numéricamente el estado base del vidrio de espín. El número de operaciones que es necesario realizar a través de cualquier algoritmo para llegar al estado de equilibrio crece exponencialmente con el volumen [Stanley, 1986].

Para terminar esta sección sólo mencionaremos que el estudio de sistemas desordenados y en particular de vidrios de espín es una de las áreas más activas de investigación en la física actualmente.

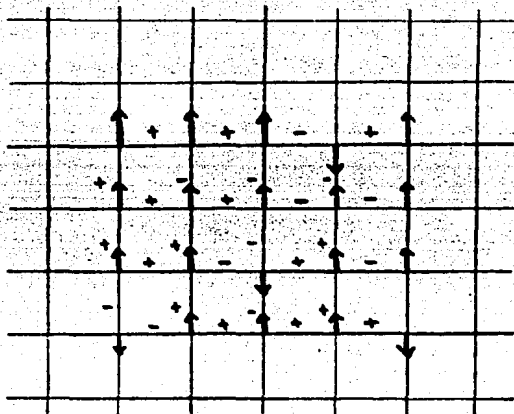


Figura 2.6 Vidrio de espín en red cuadrada.

Capítulo 3 Método de Monte Carlo.

3.1 Introducción.

A menudo los sistemas que se estudian en física son sistemas con un gran número de grados de libertad. La descripción de estos sistemas frecuentemente involucra la evaluación de integrales en espacios de dimensión muy grande. Consideremos por ejemplo un gas formado por N partículas de masa m que se encuentra a una temperatura T y cuyo Hamiltoniano es:

$$H(\vec{x}) = \sum v(r_{ij}) + \sum p_i^2 / 2m. \quad (3.1)$$

En esta ecuación $\vec{x} = (\vec{r}, \vec{p})$, $\vec{r} = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, $\vec{p} = (\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N)$, \vec{r}_i es el vector de posición de la i -ésima partícula y \vec{p}_i su momento, $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ y $v(r_{ij})$ es el potencial entre las partículas separadas por una distancia r_{ij} .

Sabemos que la función de partición canónica para este sistema está dada por:

$$Z(N, V, T) = \int \exp[-\beta H(\vec{x})] d\vec{r} d\vec{p}, \quad (3.2)$$

y que el valor esperado de cualquier observable A del sistema es:

$$\langle A \rangle = (1/Z) \int A(\vec{x}) \exp[-\beta H(\vec{x})] d\vec{r} d\vec{p}. \quad (3.3)$$

Dado que las fuerzas entre las partículas no dependen de los momentos, la integral de la ecuación (3.2) definida sobre un espacio $6N$ -dimensional se reduce al producto de dos integrales sobre espacios $3N$ -

dimensionales. Lo mismo sucede con la integral de la ecuación (3.3) en el caso en que $A(x) = A_1(r) \cdot A_2(p)$.

Para describir las propiedades termodinámicas de nuestro sistema es necesario evaluar estas integrales, pero la evaluación analítica de este tipo de integrales es la mayoría de las veces irrealizable, por lo que se recurre a la evaluación numérica. Sin embargo esta evaluación tampoco es directa, ya que no es posible utilizar los métodos numéricos convencionales excepto para valores extremadamente pequeños de N . Supongamos por ejemplo que $N=20$ y que el intervalo de integración correspondiente a cada una de las variables se divide en 10 subintervalos, esto significaría llevar a cabo 10^{60} evaluaciones. Si se cuenta con una computadora capaz de realizar 10^7 evaluaciones por segundo, el tiempo que se emplearía en la evaluación sería del orden de 10^{53} segundos, mas de 10^{34} veces la edad del Universo. En casos como este se emplea el llamado método de Monte Carlo. En general este método permite evaluar numéricamente cierto tipo de integrales mediante una discretización aleatoria del espacio en cuestión.

En lo que resta del capítulo nos ocuparemos de la descripción y aplicación de este método.

3.2 El método de Monte Carlo en mecánica estadística. Algoritmo de Metropolis et. al.

El método de Monte Carlo en mecánica estadística se emplea para estudiar modelos de sistemas termodinámicos por medio de una simulación estocástica realizada en una computadora. La descripción

del sistema que se desea estudiar se hace en términos de un modelo y el Hamiltoniano asociado a éste.

De acuerdo a lo expuesto al final de la sección anterior, para evaluar las integrales que surgen en la descripción de nuestro sistema, es necesario realizar una discretización del espacio de integración, que en este caso es el espacio de configuraciones del sistema. La realización mas sencilla de dicha discretización es a través de un muestreo aleatorio simple, sin embargo, en la evaluación de integrales del tipo de las que aparecen en las ecuaciones (3.2) y (3.3), ésto no es posible debido a que el integrando $\exp[-\beta H(x)]$ tiene variaciones de varios ordenes de magnitud. Por lo tanto es necesario implementar un algoritmo que permita muestrear eficientemente el espacio de integración.

El algoritmo que permite aplicar eficientemente el método de Monte Carlo en la evaluación del tipo de integrales en que estamos interesados, fué propuesto por N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, N. Rosenbluth, A. Teller y E. Teller en 1953 [Metropolis, 1953]. El enfoque de Metropolis et. al. se basa en la idea de muestrear aquella región del espacio de integración donde se encuentran los estados importantes del sistema, lo cual elimina el problema que conlleva el muestreo aleatorio simple.

De acuerdo con el algoritmo de Metropolis et. al. los puntos adecuados para la evaluación de una integral se eligen de acuerdo a una probabilidad $P(x_\nu)$, $\nu=1,2,\dots,M$, de tal manera que sea más probable considerar puntos en donde la función tenga valores más significativos que en otras regiones.

La probabilidad adecuada es en este caso:

$$P(x_\nu) = (1/Z) \exp[-\beta H(x_\nu)] , \quad (3.4)$$

donde Z es la función de partición definida por la ecuación (3.2). Es claro que la probabilidad dada por la ecuación (3.4) es la probabilidad adecuada, ya que al elegir los puntos con esta probabilidad, el valor esperado de la observable A definido por la ecuación (3.3) puede aproximarse por:

$$\langle A \rangle \simeq \tilde{A} = (1/M) \sum_{\nu=1}^M A(x_\nu) , \quad (3.5)$$

donde x_ν son los puntos que se tomarán en cuenta para la evaluación numérica.

La implementación del algoritmo no es directa debido a que no conocemos explícitamente la probabilidad $P(x_\nu)$, el conocerla significaría haber evaluado la función de partición Z . Sin embargo los puntos necesarios para la evaluación pueden generarse a través de una cadena de Markov.

La cadena de Markov estará caracterizada por una probabilidad de transición $W(x_\nu \rightarrow x_{\nu'})$ de un punto a otro, la cual deberá construirse de tal manera que en el límite $M \rightarrow \infty$ la probabilidad de elegir alguna configuración x_ν sea precisamente la probabilidad $P(x_\nu)$ dada por la ecuación (3.4).

Para que la probabilidad de transición $W(x_\nu \rightarrow x_{\nu'})$ tenga la propiedad deseada son condiciones necesarias y suficientes:

(1) Condición de Normalización:

$$\sum_{\nu'} W(x_\nu \rightarrow x_{\nu'}) = 1 \quad \text{para toda } \nu' . \quad (3.6)$$

(2) Condición de Ergodicidad:

$$\text{Si } P(x_{\nu}) > 0 \text{ y } P(x_{\nu'}) > 0, \text{ entonces } W(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'}) > 0. \quad (3.7)$$

Es decir siempre que las probabilidades de los estados x_{ν} y $x_{\nu'}$, no sean cero es posible ir de un estado a otro.

(3) Condición de estado estacionario:

$$\sum_{\nu} P(x_{\nu}) W(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'}) = P(x_{\nu'}) \quad \text{para toda } \nu'. \quad (3.8)$$

Una condición sencilla que garantiza que se satisfaga la condición (3) es :

$$P(x_{\nu}) W(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'}) = P(x_{\nu'}) W(x_{\nu'} \rightarrow x_{\nu}), \quad (3.9)$$

que es la condición de reversibilidad microscópica, la cual requiere que la fracción de sistemas que pasan del estado x_{ν} al $x_{\nu'}$, sea igual a la de los sistemas que pasan del estado $x_{\nu'}$ al x_{ν} .

Cuando escribimos la ecuación (3.9) en la forma :

$$P(x_{\nu})/P(x_{\nu'}) = W(x_{\nu'} \rightarrow x_{\nu})/W(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'}), \quad (3.10)$$

esta nos indica por una parte que si la probabilidad del estado x_{ν} es mayor que la del estado $x_{\nu'}$, entonces la probabilidad de transición de estado x_{ν} al estado $x_{\nu'}$ debe ser mayor que la probabilidad de pasar del estado $x_{\nu'}$ al estado x_{ν} , y por otra parte, que la razón de las probabilidades de transición solo depende del cambio en la energía, ya que:

$$P(x_{\nu'})/P(x_{\nu}) = \exp [-\beta (H(x_{\nu'}) - H(x_{\nu}))]. \quad (3.11)$$

El siguiente paso es entonces construir la probabilidad de transición $W(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'})$, de acuerdo a la condiciones (1), (2) y (3). En este punto cabe hacer notar que dichas condiciones no determinan unívocamente la

probabilidad de transición, por lo que existe cierto grado de arbitrariedad en su elección. No hay forma de saber de antemano si una probabilidad de transición dada tiene la propiedad de convergencia mencionada y en general es necesario probarla para decidir su utilidad.

Una definición que se encuentra adecuada es:

$$W(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'}) = \begin{cases} \exp[-\beta\delta H(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'})] & \text{si } \delta H(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'}) > 0 \\ 1 & \text{en otro caso.} \end{cases}, \quad (3.12)$$

donde $\delta H(x_{\nu} \rightarrow x_{\nu'}) = H(x_{\nu'}) - H(x_{\nu})$. Nótese que esta probabilidad no está normalizada, sin embargo esto no es necesario para la simulación.

Ahora bien, de acuerdo con la ecuación (3.12) dado un punto x_n en el espacio fase, para generar x_{n+1} se da un paso tentativo al punto x_t , el cual se elige de acuerdo a una probabilidad uniforme dentro de un cubo de lado ϵ alrededor de x_n , y se calcula el cambio $\delta H(x_n \rightarrow x_t)$ en la energía del sistema asociado con el paso $x_n \rightarrow x_t$. Si $\delta H(x_n \rightarrow x_t) < 0$, es decir si el nuevo estado del sistema es un estado de menor energía, el cambio se acepta y $x_{n+1} = x_t$. Por otro lado si $\delta H(x_n \rightarrow x_t) > 0$, entonces el cambio se hace con probabilidad $\exp[-\beta\delta H(x_n \rightarrow x_t)]$. En la práctica esto se lleva a cabo [Bricio, 1984] comparando la cantidad $\exp[\beta\delta H(x_n \rightarrow x_t)]$ con un número aleatorio η distribuido uniformemente en el intervalo $[0, 1]$. Si $\eta < \exp[-\beta\delta H(x_n \rightarrow x_t)]$ se lleva a cabo el cambio $x_{n+1} = x_t$, en caso contrario $x_{n+1} = x_n$. El proceso se repite hasta formar el conjunto de puntos necesario.

El parámetro ϵ que fija los estado elegibles se determina empíricamente teniendo en cuenta que si ϵ es muy grande es poco probable que se acepte el estado de prueba y si ϵ es muy pequeña el espacio fase se recorrerá muy lentamente.

Las características más importantes del algoritmo de Metropolis et. al. son: i).- calcular los promedios de una función, tomando en cuenta los valores de ésta en puntos del espacio cuyas probabilidades son significativas y ii). asegurar la convergencia del promedio calculado sobre la cadena de Markov (ec. (3.5)) hacia el promedio definido por la ecuación (3.1) cuando $M \rightarrow \infty$.

Un aspecto que en la realización práctica es importante tener en cuenta es el de que dos puntos adyacentes en la cadena son en general puntos cercanos en el espacio de configuraciones, por lo que es necesario generar un número suficientemente grande de puntos para tener información estadística relevante sobre regiones del espacio fase distintas de la inicial.

3.3 Cálculo de las Variables Termodinámicas.

El algoritmo hasta aquí descrito es un procedimiento que permite generar una configuración a partir de otra, pero que no proporciona un criterio para elegir la configuración inicial, lo cual conduce a que dicha configuración pueda construirse con cierta arbitrariedad y que no corresponda a un estado de equilibrio del sistema en consideración. Así pues, para llegar al equilibrio es necesario avanzar un cierto número de configuraciones, las cuales deberán eliminarse al calcular las observables para que estas no dependan de la condición inicial.

Debido a la alta correlación que puede existir entre los puntos adyacentes de la cadena de Markov conviene calcular las observables del sistema en configuraciones lo suficientemente separadas para que no

haya correlación entre ellas. Una manera de llevar a cabo esto es considerar configuraciones, separadas por algunos puntos dentro de la cadena, de tal manera que:

$$\tilde{A} = (1/m) \sum_{i=1}^m A(x_{\nu_i}), \quad (3.13)$$

donde $\nu_i = \nu_0 + i\mu_0$, $i=1,2,\dots,m$, y $m = (M - \nu_0) / \mu_0$.

En la ecuación (3.13) ν_0 es el número de pasos que es necesario realizar para llevar al sistema a su estado de equilibrio y μ_0 es el número de pasos que separan a las configuraciones en donde se calculan las observables. Los valores de estos parámetros dependerán en general del sistema particular que se este estudiando.

Una medida del error estadístico de A esta dada por la desviación estandar δA :

$$(\delta A)^2 = (1/m) \sum_{i=1}^m [A(x_i) - \tilde{A}]^2 \quad (3.14)$$

lo cual indica, en general, que el error en el cálculo de A disminuye al aumentar el número m de puntos que se tomen en cuenta.

Debido a esta última observación, dado un número M de puntos en la cadena, sería conveniente tomar mediciones con mucha frecuencia, es decir elegir μ_0 pequeña. Sin embargo esto puede resultar costoso en tiempo de máquina y por otro lado no ser lo mas conveniente para lograr un muestreo eficiente. Es necesario entonces tener un criterio que tome en cuenta estos dos aspectos. En el próximo capítulo nos referiremos a este criterio.

Algunos aspectos que pueden afectar la confiabilidad de los cálculos y que por lo tanto hay que tomar en cuenta son:

(1) En la simulación se están empleando números que son en realidad pseudo-aleatorios, ya que se generan a través de un procedimiento determinista. Para determinar la influencia de estos números sobre los promedios se han hecho estudios [Binder] con sistemas cuya solución se conoce, encontrándose que cuando se toman en cuenta del orden de 10^2 o 10^3 configuraciones por partícula:

$$(\langle A \rangle - \bar{A}) / \langle A \rangle \approx 10^{-2}, \quad (3.15)$$

donde \bar{A} es el promedio calculado con los números pseudoaleatorios.

(2) En el método de Monte Carlo la discretización no es un problema de principio pues se ha demostrado su convergencia estocástica, queda sin embargo por comprobar si en la práctica ésta es alcanzable en un número razonable de pasos. Esto ha sido comprobado favorablemente en muchos casos.

(3) El tratar de simular sistemas macroscópicos formados por alrededor de 10^{23} partículas a través de sistemas de aproximadamente 10^3 partículas. Este inconveniente se puede reducir mediante el uso de condiciones a la frontera periódicas.

Además de los aspectos anteriores, hay comportamientos intrínsecos de carácter físico de cada sistema que dificultan el alcanzar el equilibrio termodinámico, por ejemplo, en puntos termodinámicos cercanos a un punto crítico.

En el siguiente capítulo comentaremos todos los detalles finos que hay que cuidar dependiendo de la naturaleza del problema particular que se trate. Estos detalles los analizaremos en el caso de la simulación del Modelo de Ising. También se dará una descripción del programa que se implementó y de su funcionamiento.

Capítulo 4. Descripción del programa de computadora.

4.1 Introducción.

En este capítulo describiremos el programa que se implementó para simular el modelo de Ising bidimensional. El programa está diseñado para simular este modelo en el caso bidimensional en red cuadrada, cuyo Hamiltoniano está dado por la ecuación (2.4). La simulación se lleva a cabo por medio del método de Monte Carlo y haciendo uso del algoritmo de Metropolis et. al. (sección 3.2). En la simulación se imponen al modelo condiciones a la frontera periódicas, de tal manera que el modelo se encuentra sobre la superficie de un toro.

Por medio de este programa es posible también simular otros modelos, como los mencionados en la sección 2.4. Para llevar a cabo estas simulaciones es necesario realizar algunas modificaciones al programa. A éstas nos referiremos más adelante.

El programa está implementado en lenguaje PASCAL y está diseñado para correrse en una microcomputadora personal, compatible con el sistema IBM-PC, de 16 bits con 512 K de memoria residente. En la siguiente sección se presenta una descripción de este programa.

4.2 Estructura del programa.

El programa ISING, cuyo listado se encuentra al final de esta sección, realiza una simulación de Monte Carlo del modelo de Ising

bidimensional en red cuadrada, en el caso ferromagnético, empleando el algoritmo de Metropolis et. al.

Para implementar el algoritmo de Metropolis et. al., el paso de una configuración x_ν a otra $x_{\nu'}$, puede consistir por ejemplo en cambiar aleatoriamente todos los espines, sin embargo esto puede producir una configuración $x_{\nu'}$, muy diferente de x_ν y por lo tanto habrá una probabilidad muy grande de rechazarla. Por esta razón y otras que veremos mas adelante, tomaremos como configuración tentativa una que difiera de la anterior en tan solo un espín. Recuérdese que el algoritmo de Metropolis et. al. nos dice que el cambio de configuración se acepta si:

$$W(x_\nu \rightarrow x_{\nu'}) = \exp \{-\beta \delta H(x_\nu \rightarrow x_{\nu'})\} > \eta, \quad (4.1)$$

donde $\delta H(x_\nu \rightarrow x_{\nu'})$ es el cambio en la energía asociado al paso $x_\nu \rightarrow x_{\nu'}$, y η es un número aleatorio distribuido uniformemente en el intervalo $[0, 1]$.

Ahora bien, como solo se esta considerando el cambio de un espín $S_{i,j}$ a la vez:

$$\delta H(x_\nu \rightarrow x_{\nu'}) = 2S_{i,j} (Jf+h), \quad (4.2)$$

donde $f = S_{i+1,j} + S_{i-1,j} + S_{i,j+1} + S_{i,j-1}$, es la suma de los espines que son vecinos cercanos del espín $S_{i,j}$ y h es el campo magnético externo.

Dado que $S_{i,j} = \pm 1$, es fácil ver que f sólo puede tomar cinco valores $0, \pm 2, \pm 4$ y por lo tanto solo tenemos 10 posibles valores de $W(x_\nu \rightarrow x_{\nu'})$. Estos se calculan una sola vez y se almacenan en la memoria a fin de evitar su cálculo repetidamente. Nótese que si la configuración $x_{\nu'}$ difiere en más de un espín de la anterior, $W(x_\nu \rightarrow x_{\nu'})$ tomará una forma

más complicada.

Antes de iniciar la simulación es necesario proporcionar algunos datos tales como las variables que determinan el tamaño del sistema y el estado termodinámico en el que se encuentra, además de los parámetros que intervienen en el cálculo de los promedios: N_t , N_g , T_g y F , a los cuales nos referiremos en la sección 4.3.

El tamaño del sistema está determinado por N_x y N_y , que son el número de espines en cada renglón y en cada columna de la red respectivamente. El estado termodinámico lo determinan la constante de interacción J y el campo magnético externo h , ambos en unidades de $K_b T$. Una vez proporcionada esta información la simulación se inicia dando una configuración inicial aleatoria x_0 y a continuación se procede a realizar los pasos de Monte Carlo que constituyen la termalización del sistema. Llamamos aquí pasos de termalización a los μ_0 pasos, que según lo expuesto en la sección 3.2 es necesario realizar a fin de que los promedios de las observables no dependan de la condición inicial.

Cada paso de Monte Carlo consiste en recorrer sistemáticamente la red aplicando el algoritmo a la configuración que se obtiene al invertir uno de los espines de la red. La red y el número de cambios aceptados se muestran en la pantalla de la microcomputadora después de cada paso de Monte Carlo. La red se dibuja en la pantalla asignando un cuadro de color a los espines positivos y un cuadro negro a los espines negativos, obteniéndose una imagen como la que se muestra en la Figura (4.1). Una vez que se ha llevado a cabo la termalización del sistema se procede a calcular los promedios de las observables del sistema.

Las observables básicas (energía y magnetización) se calculan cada ν_0 pasos de Monte Carlo, estos valores se van almacenando en grupos,

```
PROGRAM ISING (INPUT, OUTPUT);
($P+)
Label
Var
  O, 1, 2, 3, 4;
  NX, NY, NSpines, NGrupos, TAM, FREQ, NTERM, TOP, BOT,
  ACCEPT, GRUPO, MORE, SWEEP, I, J: INTEGER;
```

```
  B, JJ, ENERG, SUME, SUME2, SUMSIGE, SUMSIGM,
  SUMSM, SUMSM2, SUMCE, SUMCE2, SUMM, SUMM2,
  EGRUPO, EGRUPO2, MAG, MGRUPO, MGRUPO2,
  SEMILLA: REAL;
```

```
  Spin: ARRAY[1..42, 1..79] of INTEGER;
```

```
  R: ARRAY[1..5, 1..2] of REAL;
```

```
  RESPUESTA: CHAR;
```

```
Procedure INICIALIZA;
```

```
Label 5, 6;
```

```
BEGIN (** EMPIEZA EL PROCEDIMIENTO INICIALIZA **)
```

```
  Clrscr;
```

```
5: Gotoxy(10, 10);
```

```
  Write('Da la longitud horizontal de la red, (<=79) ');
```

```
  Readln(NX);
```

```
  If (NX < 0) or (NX > 79) then goto 5;
```

```
6: Gotoxy(10, 12);
```

```
  Write('Da la longitud vertical de la red, (<=42 y par) ');
```

```
  Readln(NY);
```

```
  If (Not((NY <= 42) and (NY mod 2 = 0) and (NY > 0))) then goto 6;
```

```
  NSpines := NX * NY;
```

```
  RANDOMIZE;
```

```
  For I := 1 to NY do
```

```
    BEGIN
```

```
      For J := 1 to NX do
```

```
        If (RANDOM < 0.5) then Spin[I, J] := 1
```

```
        Else Spin[I, J] := -1;
```

```
      END;
```

```
  TOP := Trunc(12 - NY/4);
```

```
  BOT := Trunc(13 + NY/4);
```

```
  B := 0;
```

```
  JJ := 0;
```

```
END; (** FIN DEL PROCEDIMIENTO INICIALIZA **)
```

```
Procedure PASOSDEMONTECARLO;
```

```
Var F, IM, IP, JM, JP, ESPIN: Integer;
```

```
  Z: REAL;
```

```
BEGIN (** EMPIEZA EL PROCEDIMIENTO PASOS DE MONTECARLO **)
```

```
  ACCEPT := 0;
```

```
  For I := 1 to NY do
```

```
    BEGIN
```

```
      If I < NY then IP := SUCC(I) Else IP := 1;
```

```
      If I > 1 then IM := I - 1 else IM := NY;
```



```
For J:=1 to NX do
```

```
  BEGIN
```

```
    If J<NX then JP:=SUCC(J) Else JP:=1;
```

```
    If J>1 then JM:=J-1 Else JM:=NX;
```

```
    ESPIN:=Spin[I,J];
```

```
    F:=Spin[IF,J]+Spin[IM,J]+Spin[I,JP]+Spin[I,JM];
```

```
    Z:=RTRUNC(3+F/2),TRUNC((3+ESPIN)/2)];
```

```
    If RANDOM<Z then
```

```
      BEGIN
```

```
        Spin[I,J]:=-ESPIN;
```

```
        ACCEPT:=SUCC(ACCEPT);
```

```
      END;
```

```
  END;
```

```
END;
```

```
      (** FIN DEL PROCEDIMIENTO PASOS DE MONTECARLO **)
```

```
Procedure DESPLIEGA;
```

```
Var SY: Integer;
```

```
    CARACTER: Char;
```

```
BEGIN      (** EMPIEZA EL PROCEDIMIENTO DESPLIEGA **)
```

```
  I:=2;
```

```
  REPEAT
```

```
    For J:=1 to NX do
```

```
      BEGIN
```

```
        If Spin[I,J]==-1 then
```

```
          If Spin[I-1,J]=1 then SY:=223 Else SY:=0
```

```
        Else
```

```
          If Spin[I-1,J]=1 then SY:=219 Else SY:=220;
```

```
          CARACTER:=CHAR(SY);
```

```
          Gotoxy(39+J-TRUNC(NX/2),TOP+TRUNC(I/2));
```

```
          Write(CARACTER);
```

```
        END;
```

```
      I:=I+2;
```

```
    UNTIL I=NY+2
```

```
  END;
```

```
      (** FIN DEL PROCEDIMIENTO DESPLIEGA **)
```

```
Procedure LEEPARAMETROS;
```

```
Label 7;
```

```
BEGIN      (** EMPIEZA EL PROCEDIMIENTO LEEPARAMETROS **)
```

```
  Clrscr;
```

```
  Gotoxy(10,8);
```

```
  Writeln("El valor actual de JJ es ",JJ:1:4);
```

```
  Gotoxy(10,10);
```

```
  Write("Da el nuevo valor de JJ ");
```

```
  Readln(JJ);
```

```
  Gotoxy(10,12);
```

```
  Writeln("El valor actual de B es ",B:1:3);
```

```
  Gotoxy(10,14);
```

```
  Write("Da el nuevo valor de B ");
```

```
  Readln(B);
```

```
  Gotoxy(10,16);
```

```
  Write("Da el numero de PASOS DE TORMALIZACION ");
```

```

Readln(NTERM);
Gotoxy(10,18);
Write("Da el numero de grupos ");
Readln(NGrupos);
Gotoxy(10,20);
Write("Da el tamano de los grupos ");
Readln(TAM);
Gotoxy(10,22);
Write("Da la frecuencia de muestreo ");
Readln(FREQ);
If FREQ<=0 then goto 7;
For I:=1 to 5 do
  BEGIN
    R[I,2]:=Exp(-2*(JJ*(2*I-6)+B));
    R[I,1]:=1/R[I,2];
  END;
END;
(** FIN DEL PROCEDIMIENTO LEEPAREMETROS **)

```

Procedure TERMALIZA;

```

BEGIN
  LEEPAREMETROS;
  Clscr;
  Gotoxy(1, TOP);
  Write("NX=", NX, " NY=", NY, " JJ=", JJ, " JJ:1:4, " B=", B, " B:1:3);
  If NTERM>0 then
    BEGIN
      For SWEEP:=1 to NTERM do
        BEGIN
          PASOSDEMONTECARLO;
          Gotoxy(35, TOP);
          Write(" TERM SWEEP ", SWEEP, " DE ", NTERM);
          Write(" Accept=", ACCEPT/NSpines:1:3);
          {If (SWEEP mod 5 = 0) then}
          DESPLIEGA;
        END;
      END;
    END;
  MORE:=NGrupos;
  SUMM:=0;
  SUMM2:=0;
  SUMSIGM:=0;
  SUME:=0;
  SUME2:=0;
  SUMSIGE:=0;
  SUMSM:=0;
  SUMSM2:=0;
  SUMCE:=0;
  SUMCE2:=0;
END;
(** FIN DEL PROCEDIMIENTO TERMALIZA **)

```

Procedure OBSERVABLES;
Var IM, JM, SUMS: Integer;

```

BEGIN                                (** EMPIEZA EL PROCEDIMIENTO OBSERVABLES**)
MAG:=0;
SUMS:=0;
For I:=1 to NY do
  BEGIN
    If I>1 then IM:=I-1 Else IM:=NY;
    For J:=1 to NX do
      BEGIN
        If J>1 then JM:=J-1 Else JM:=NX;
        SUMS:=SUMS+Spin[I,J]*(Spin[IM,J]+Spin[I,JM]);
        MAG:=MAG+Spin[I,J];
      END
    END;
  ENDR;
ENERG:=(-JJ*SUMS-B*MAG);
END;                                (** FIN DEL PROCEDIMIENTO OBSERVABLES **)

```

```

Procedure CALCULOS;
var E,M,CE,SM,SIGE,SIGE1,SIGM,SIGM1,SIGCE,SIGSM,PROME,
    PROMM2,PROMM,PROMM2,E1,SIGEE,M1,SIGMM,SM1,CE1:REAL;

```

```

BEGIN                                (** EMPIEZA EL PROCEDIMIENTO CALCULOS **)
PROMM:=MGRUPO/TAM;
PROMM2:=MGRUPO2/TAM;
PROME:=EGRUPO/TAM;
PROME2:=EGRUPO2/TAM;
SM:=PROMM2-SQR(PROMM);
CE:=PROME2-SQR(PROME);
SIGM:=SQRT(SM/TAM);
SIGE:=SQRT(CE/TAM);
E1:=PROME/NSpines;
SIGEE:=SIGE/NSpines;
M1:=PROMM/NSpines;
SIGMM:=SIGM/NSpines;
SM1:=SM/NSpines;
CE1:=CE/NSpines;
Gotoxy(1,BOT);
Write('GRUPO ',GRUPO);
Write(' E=',E1:1:3,'+-',SIGEE:1:3);
Write(' M=',M1:1:3,'+-',SIGMM:1:3);
Write(' Sm=',SM1:1:3,' Ce=',CE1:1:3);
SUMM:=SUMM+PROMM;
SUMM2:=SUMM2+SQR(PROMM);
SUMSIGM:=SUMSIGM+SQR(SIGM);
SUME:=SUME+PROME;
SUME2:=SUME2+SQR(PROME);
SUMSIGE:=SUMSIGE+SQR(SIGE);
SUMSM:=SUMSM+SM;
SUMSM2:=SUMSM2+SQR(SM);
SUMCE:=SUMCE+CE;
SUMCE2:=SUMCE2+SQR(CE);
E:=SUME/GRUPO;
SIGE:=SQRT((SUME2/GRUPO-SQR(E))/GRUPO);
SIGE1:=SQRT(SUMSIGE)/GRUPO;
M:=SUMM/GRUPO;
SIGM:=SQRT((SUMM2/GRUPO-SQR(M))/GRUPO);

```

```

SIGM1:=SQRT(SUMSIGM)/GRUPO;
SM:=SUMSM/GRUPO;
SIGSM:=SQRT((SUMSM2/GRUPO-SQR(SM))/GRUPO);
CE:=SUMCE/GRUPO;
SIGCE:=SQRT((SUMCE2/GRUPO-SQR(CE))/GRUPO);
E:=E/NSpines;
SIGE:=SIGE/NSpines;
SIGE1:=SIGE1/NSpines;
M:=M/NSpines;
SIGM:=SIGM/NSpines;
SIGM1:=SIGM1/NSpines;
Sm:=SM/NSpines;
SIGSM:=SIGSM/NSpines;
Ce:=CE/NSpines;
SIGCE:=SIGCE/NSpines;
Gotoxy(1,24);
Write('Cantidades Totales');
Gotoxy(1,25);
Write(' E=',E:1:3,'+-',SIGE:1:3,'/',SIGE1:1:3);
Write(' M=',M:1:3,'+-',SIGM:1:3,'/',SIGM1:1:3);
Write(' Sm=',Sm:1:3,'+-',SIGSM:1:3);
Write(' Ce=',Ce:1:3,'+-',SIGCE:1:3);
END;
(** FIN DEL PROCEDIMIENTO CALCULOS **)

```

Procedure GRUFOS;

```

BEGIN
(** EMPIEZA EL PROCEDIMIENTO GRUFOS **)
Clrscr;
Gotoxy(1,TOP);
Write('NX=',NX,' NY=',NY,' JJ=',JJ:1:4,' B=',B:1:3);
For GRUPO:=NGrupos-MORE+1 TO NGrupos do
  BEGIN
MGRUPO:=0;
MGRUPO2:=0;
EGRUPO:=0;
EGRUPO2:=0;
For SWEEP:=1 TO FREQ*TAM do
  BEGIN
PASOSDEMONTECARLO;
DESPLIEGA;
If (SWEEP mod FREQ = 0) then
  BEGIN
Gotoxy(31,TOP);
Write('Dato ',trunc(SWEEP/FREQ):2,' de ',TAM:2);
Gotoxy(48,TOP);
Write('En el grupo ',GRUPO:2,' de ',NGrupos:2);
OBSERVABLES;
MGRUPO:=MGRUPO+MAG;
MGRUPO2:=MGRUPO2+SQR(MAG);
EGRUPO:=EGRUPO+ENERG;
EGRUPO2:=EGRUPO2+SQR(ENERG);
  END;
Gotoxy(69,TOP);
Write('Acept=',ACCEPT/NSpines:1:3);
  END;
END;

```

```

    CALCULOS;
END;
END;          (** FIN DEL PROCEDIMIENTO GRUPOS **)

BEGIN          (***** EMPIEZA EL PROGRAMA PRINCIPAL *****)
  Clrscr;
  Gotoxy(10,10);
  Write(' * * * * * ');
  Gotoxy(10,11);
  Write(' Este programa realiza una simulacion del modelo ');
  Gotoxy(10,12);
  Write(' de Ising bidimensional en los casos ferromagnetico ');
  Gotoxy(10,13);
  Write(' y antiferromagnetico haciendo uso del algoritmo de ');
  Gotoxy(10,14);
  Write(' Metropolis et. al. ');
  Gotoxy(10,15);
  Write(' * * * * * ');
  Gotoxy(10,17);
  Write(' *** PARA CONTINUAR OPRIME UNA TECLA ***',Char(7));
0:   If KEYPRESSED then
      BEGIN
1:     INICIALIZA;
2:     TERMALIZA;
      GRUPOS;
      Gotoxy(30,24);
      Write(' ***PARA CONTINUAR OPRIME UNA TECLA***',Char(7));
3:     If KEYPRESSED then
          BEGIN
            Clrscr;
            Gotoxy(10,10);
            Write(' Cuantos grupos mas quieres formar? ');
            Gotoxy(10,11);
            Write(' (<=0 para terminar) ');
            Readln(MORE);
            If MORE>0 then
              BEGIN
                NGrupos:=NGrupos+MORE;
                GRUPOS;
                Gotoxy(30,24);
                Write(' ***PARA CONTINUAR OPRIME UNA TECLA***',Char(7));
4:                If ( NOT KEYPRESSED ) then Goto 4
                    Else Goto 3;
              END
            Else
              BEGIN
                Gotoxy(10,12);
                Write(' Quieres cambiar el tamaño de la red?(S/N) ');
                Readln(RESPUUESTA);
                If (RESPUUESTA='S') or (RESPUUESTA='s') then Goto 1
                    Else Goto 2
              END;
            END
          Else Goto 3
        END
      Else Goto 0
    END.
          (***** FIN DEL PROGRAMA PRINCIPAL *****)

```

cada uno con T_g elementos. En cada grupo se calculan el valor medio y la desviación estándar de cada observable. El proceso se repite hasta formar un total de N_g grupos y a medida que estos se van formando los promedios de cada observable se combinan en un gran promedio.

NX=30 NY=30 JJ=0.5000 B=0.000



Figura 4.1 Imágen de la pantalla durante la simulación.

Para calcular los errores estadísticos asociados a estos últimos promedios existen dos opciones, la primera es considerar que estos promedios son independientes unos de otros y aplicar la ley de los grandes números, de acuerdo a la cual:

$$\sigma^2 = (1/m) [\langle A^2(x_i) \rangle - \langle A(x_i) \rangle^2] \quad (4.3)$$

La segunda alternativa es calcular la desviación estándar como el promedio de las desviaciones estándar en cada uno de los grupos.

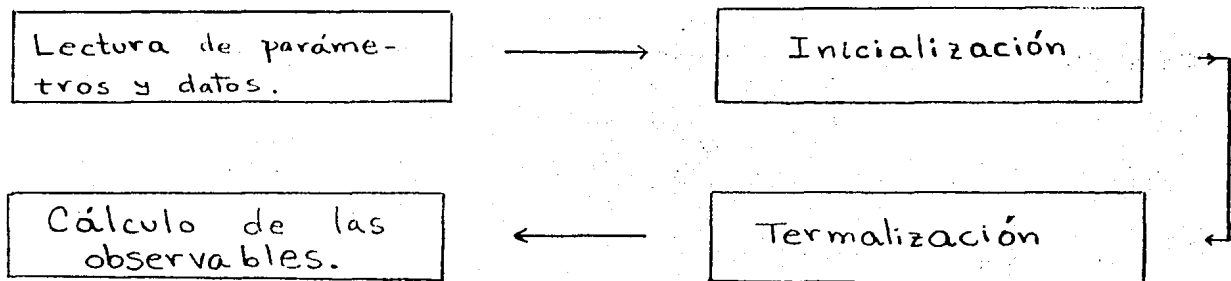
Si la frecuencia de muestreo es suficientemente grande, estas dos estimaciones coinciden, pero si ésta es muy pequeña habrá una alta correlación entre los valores de las observables, por lo que la segunda estimación resultara considerablemente menor que la primera. Nótese que esta técnica no es aplicable al calor específico y a la susceptibilidad magnética, ya que ellas mismas son fluctuaciones en la energía y la magnetización respectivamente. Por lo tanto las desviaciones estándar de estas se calculan con el primer método. Para mayor claridad ver la Figura 4.2, donde se da un diagrama del funcionamiento del programa.

Cada vez que se forma un nuevo grupo se calculan los promedios y desviaciones correspondientes, después de lo cual se actualizan los grandes promedios, todos estos resultados se muestran en la pantalla. A continuación se encuentra el listado del programa utilizado para la simulación de un ferromagneto. En el programa $J = JJ$, $h = B$, $\nu_0 = \text{FREQ}$, $\mu_0 = \text{NTERM}$, $N_g = \text{NGRUPOS}$ y $T_g = \text{TAM}$. Nótese que la cantidad JJ es proporcional a $1/T$ y para efectos prácticos se considera que $JJ=1/T$.

La simulación de un antiferromagneto implica algunos cambios que describiremos en la sección 4.4.

4.3 Calibración del programa.

Nos referiremos ahora a los criterios que se siguieron para determinar los valores de los parámetros que intervienen en el cálculo de los promedios de las observables. Como se mencionó en la sección 4.1 estos son NTERM , NGRUPOS , TAM y FREQ .



Desglosamos a continuación el cálculo de la magnetización M :

$$\begin{array}{l}
 M_{11} \xrightarrow{\nu_0} M_{12} \xrightarrow{\nu_0} \dots \xrightarrow{\nu_0} M_{1T_g} \\
 M_{21} \xrightarrow{\nu_0} M_{22} \xrightarrow{\nu_0} \dots \xrightarrow{\nu_0} M_{2T_g} \\
 M_{N_g1} \xrightarrow{\nu_0} M_{N_g2} \xrightarrow{\nu_0} \dots \xrightarrow{\nu_0} M_{N_gT_g}
 \end{array}$$

$$M_i = \frac{1}{T_g} \sum_{j=1}^{T_g} M_{ij}$$

$$\sigma_{M_i} = \left[\langle M_i^2 \rangle - \langle M_i \rangle^2 \right]^{1/2}$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} M_i \quad ; \quad \langle M^2 \rangle = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} M_i^2$$

$$(\sigma_M)_1 = \left[\frac{1}{N_g} \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right]^{1/2} \quad ; \quad (\sigma_M)_2 = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} \sigma_{M_i}$$

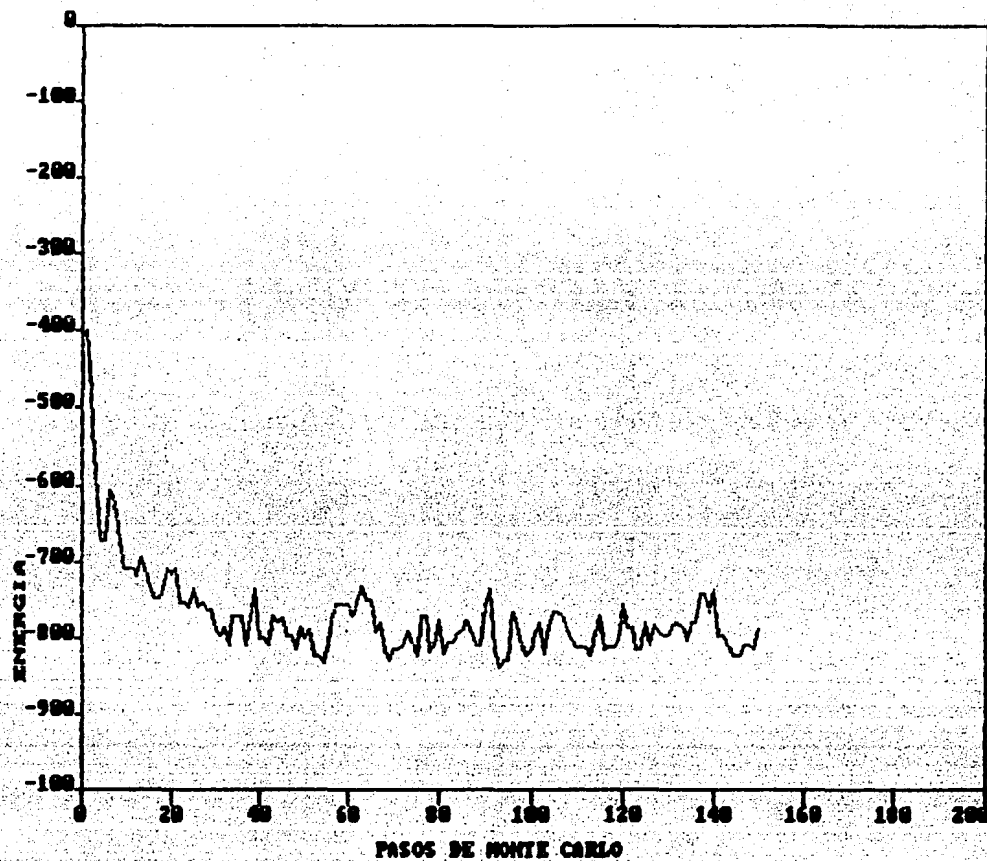
Figura 4.2 Diagrama del funcionamiento del programa.

El primero de ellos se determina al construir una gráfica de la energía como función del número de pasos de Monte Carlo. Como puede verse de la Gráfica 4.1 después de cierto número de paso de Monte Carlo, la energía oscila alrededor de un valor, es entonces cuando decimos que el sistema ha llegado al equilibrio. El número de pasos en que el sistema alcanza el equilibrio depende del estado termodinámico, pero se encuentra que un valor aceptable es $NTERM=100$.

Para determinar la frecuencia $FREQ$ con que se calculan los valores de las observables se procedió a calcular los promedios y los errores estadísticos de la energía y la magnetización para diferentes valores de JJ y diferentes valores de $FREQ$, encontrándose que para $FREQ=10$ las dos estimaciones de los errores estadísticos (sección 4.2) de los promedios de la energía y la magnetización coinciden la mayoría de las veces.

Para determinar los valores de $NGRUPOS$ y TAM es necesario tener en cuenta que si bien un gran número de datos es lo más aconsejable para obtener buenos resultados, esto causa un aumento en el tiempo de máquina requerido. Se realizaron corridas del programa con valores de $NGRUPOS$ y TAM , tales como $NGRUPOS=10$ y $TAM=10$, $NGRUPOS=15$ y $TAM=10$ o $NGRUPOS=15$ y $TAM=15$, observándose que en los dos últimos casos se logra tan solo una pequeña mejoría, con respecto al primero, en las desviaciones estándar de los promedios, la cual no justifica el aumento de tiempo de máquina. Consecuentemente los valores utilizados en todas las corridas de los programas fueron $NTERM=100$, $NGRUPOS=10$, $TAM=10$ y $FREQ=10$. El tamaño del sistema que se encuentra adecuado es 30×30 espines, cabe señalar que esta elección se hace en términos de que el tiempo de máquina es

proporcional al tamaño del sistema y que por lo tanto no es posible trabajar con redes muy grandes. Este fué el tamaño mínimo para el que se encuentran resultados aceptables.



Grafica 4.1 Energía vs pasos de Monte Carlo
(Ferromagnetismo, $B=0$, $T=2.0$).

4.4 Simulación de otros Modelos.

El programa implementado permite simular también el modelo de

Ising en el caso antiferromagnético. Para ello la única modificación que es necesario realizar consiste en distinguir dos subredes (una que contenga a los espines positivos y otra a los espines negativos) y hacer que el programa calcule la magnetización en cada una de estas subredes así como su promedio. Nótese que en este caso la magnetización total deja de ser una observable adecuada, ya que en ausencia de campo magnético externo, el promedio de ésta es cero para cualquier temperatura. La observable adecuada es ahora la magnetización en las subredes, la cual deberá tener un comportamiento similar al de la magnetización total de un ferromagneto.

Otros modelos que pueden simularse a través de versiones modificadas de este programa son modelos anisotrópicos, modelos desordenados (los cuales pueden o no presentar frustración), modelos tridimensionales, etc. En este trabajo solo consideraremos dos casos: un ferromagneto anisotrópico y un ferromagneto desordenado que presenta frustración.

Los cambios que requiere el programa para simular un ferromagneto anisotrópico consisten en introducir dos constantes de acoplamiento entre los espines, una a lo largo de los renglones (J_H) y otra a lo largo de las columnas (J_V). Nótese que introducir estas dos constantes de acoplamiento lleva implícita una modificación del Hamiltoniano del modelo.

El propósito de estudiar un modelo anisotrópico es el de estudiar el comportamiento de la temperatura crítica cuando una de las constantes de interacción (en este caso J_V) tiende a cero, es decir cuando el sistema pasa de tener dos dimensiones a tener una dimensión.

Para simular un modelo desordenado que presente frustración es necesario también tener dos constantes de interacción, pero que ahora toman valores simétricos $+JJ$ y $-JJ$. Es claro que esta modificación también implica una modificación del Hamiltoniano del sistema, lo cual es necesario tener en cuenta para la simulación.

En este caso lo que se pretende mostrar es la existencia de varios estados metaestables que poseen la misma energía y que están igualmente frustrados. Para ello se trabajó con un sistema formado por 16 espines y en la Figura 4.3 se muestra la distribución de interacciones empleada.

En el próximo capítulo se expondrán los resultados obtenidos en cada uno de los casos estudiados.

11	+	12	+	13	+	14	+	15
-	+	-	+	-	+	-	+	-
21	+	22	+	23	+	24	+	25
+	-	+	-	+	-	+	-	+
31	+	32	+	33	+	34	+	35
-	+	-	+	-	+	-	+	-
41	+	42	+	43	+	44	+	45
+	-	+	-	+	-	+	-	+
11		12		13		14		15

Figura 4.3 Ferromagneto desordenado frustrado.

Capítulo 5. Resultados y Conclusiones.

5.1 Resultados.

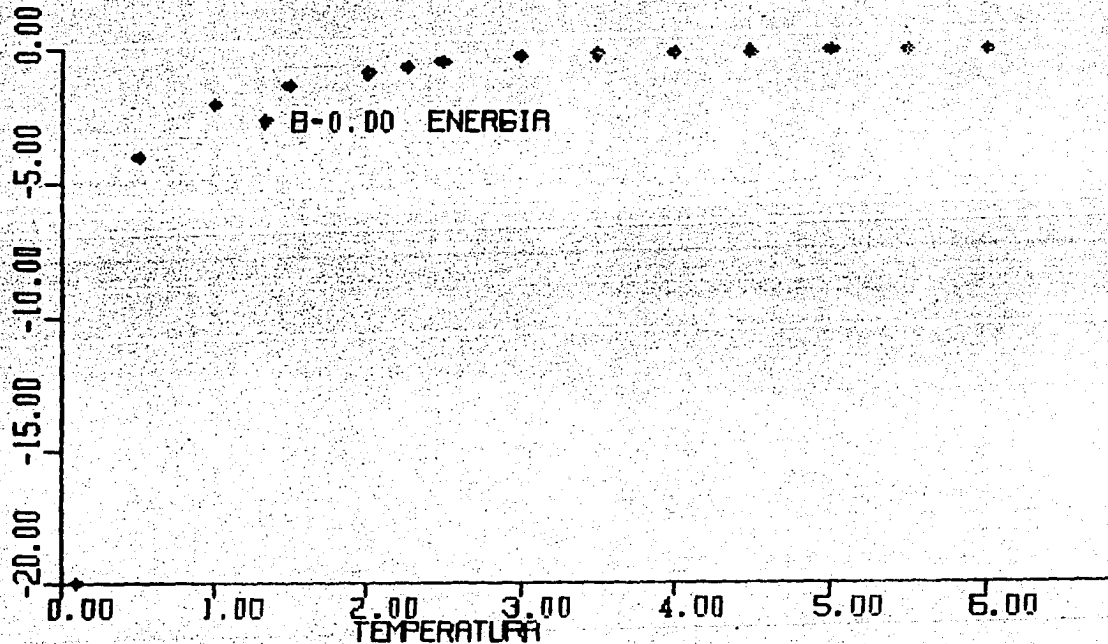
Se expondrán en esta sección los resultados obtenidos en los casos estudiados: ferromagnetismo con y sin campo magnético externo, antiferromagnetismo sin campo magnético externo, ferromagnetismo anisotrópico (en el espacio real) sin campo magnético externo y finalmente un sistema que presenta frustración.

5.1.a Ferromagnetismo sin campo magnético externo.

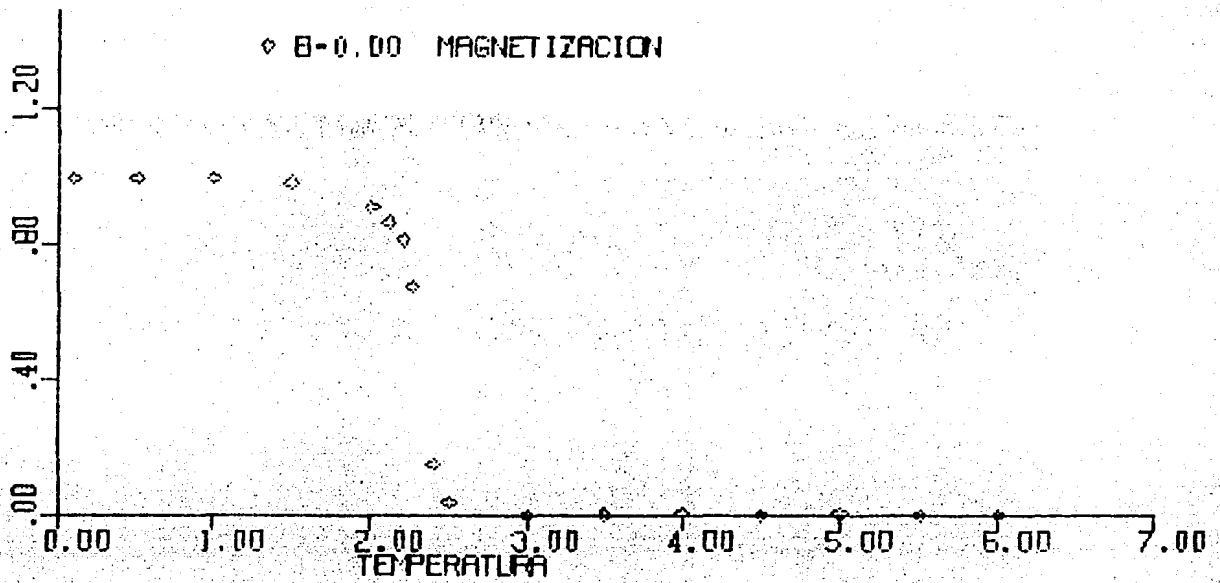
En este caso las observables que el programa calcula son energía, magnetización, calor específico y susceptibilidad magnética. Los resultados se muestran en las Gráficas 5.1 - 5.4 respectivamente. El comportamiento cualitativo de las observables concuerda bastante bien con los resultados de la solución de Onsager (Gráficas 2.2. y 2.3). Las diferencias que se observan pueden entenderse en términos de que el sistema que se está tratando es finito. Entre ellas están el valor de la temperatura crítica que es $T_0=2.4$ (y no $T_c=2.26918..$), la no divergencia de la susceptibilidad magnética y la caída más o menos suave de la magnetización hacia cero en $T=T_0$. Se observa sin embargo un pico bien marcado tanto en la gráfica de la susceptibilidad magnética como en la de la capacidad calorífica en $T=T_0$ (Gráficas 5.3 y 5.4). El valor T_0 se determinó a partir de la gráfica 5.1 tomando como T_0 el

valor de T para el cual la magnetización se anula por primera vez viniendo de temperaturas bajas. Los incrementos en la temperatura al construir la Gráfica fueron de 0.1 unidades, por lo que el valor de T_0 no puede darse con mas cifras.

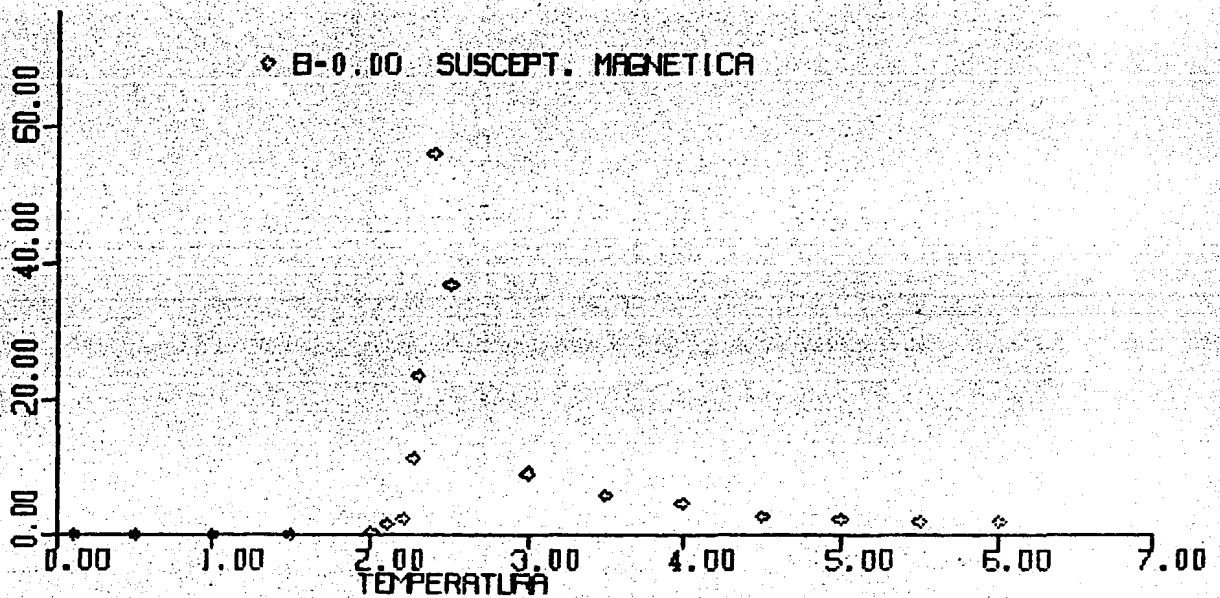
El modelo exhibe por abajo de T_0 una fase ordenada en la que la mayoría de los espines estan orientados en la misma dirección por lo que se observa una magnetización espontánea. En la vecindad de T_0 se observa la formación de dominios característica de la transición de fase (Figura 1.5). La diversidad de tamaños de estos dominios aumenta a medida que nos aproximamos a T_0 , siendo esto una manifestación de la existencia de correlaciones a todas las escalas. Por abajo de T_0 , el modelo exhibe una fase paramagnética (es decir desordenada), que esta caracterizada por la orientación aleatoria de los espines y la desaparición de la magnetización espontánea.



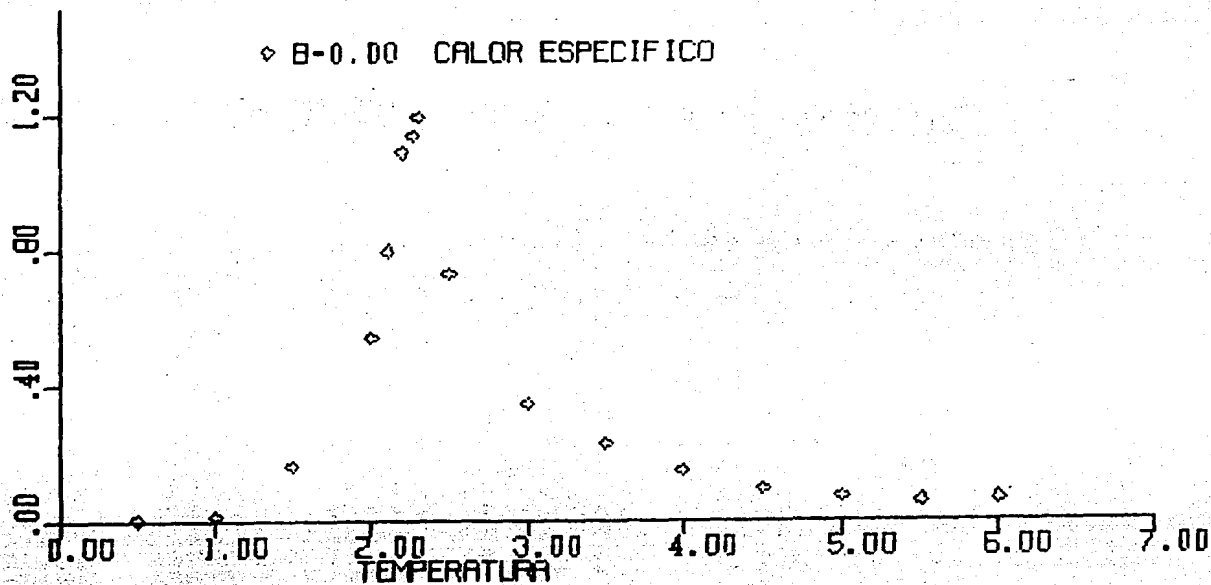
Gráfica 5.1 Energía vs T (Ferromagnetismo, $B=0$).



Gráfica 5.2 Magnetización vs T (Ferromagnetismo, $B=0$).



Gráfica 5.3 Susceptibilidad magnética vs T (Ferromagnetismo, $B=0$).

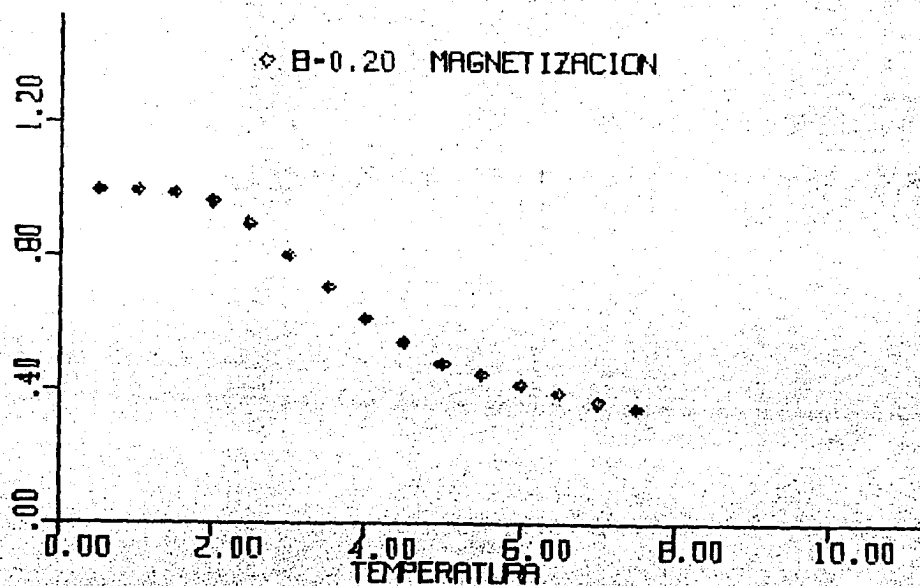


Gráfica 5.4 Capacidad calorífica vs T
(Ferromagnetismo, $B=0$).

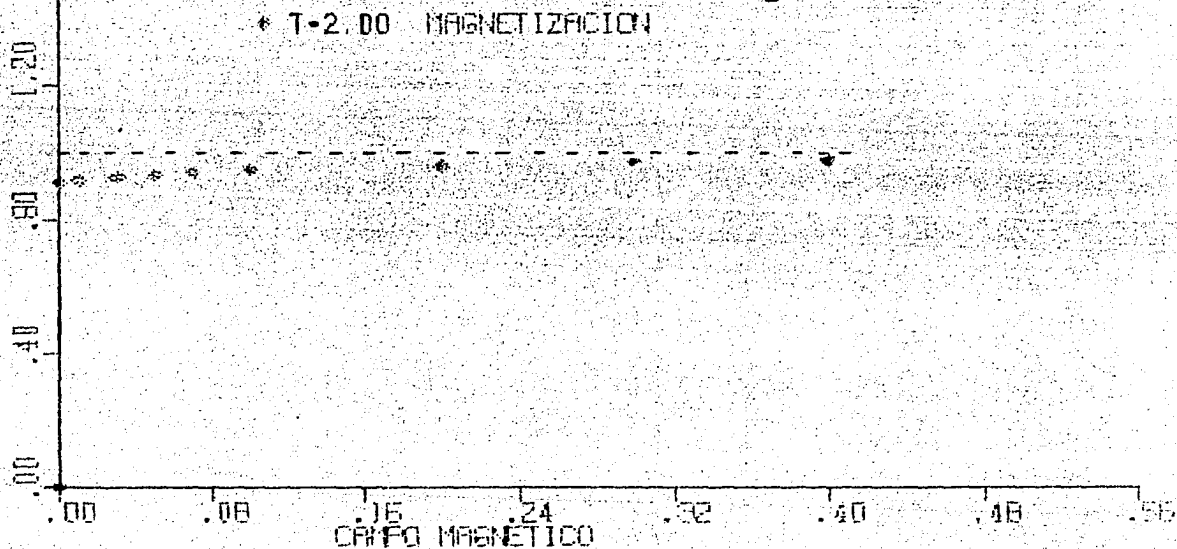
5.1.b Ferromagnetismo con campo magnético externo.

Cuando se aplica un campo magnético externo a un ferromagneto se observa que la magnetización tiene una caída mucho más suave que en el caso anterior, esto se muestra en la Gráfica 5.5. Otro comportamiento que puede estudiarse al aplicar un campo magnético externo a un ferromagneto es el de la magnetización por arriba y por abajo de T_0 como función de este campo magnético. Como se muestra en las Gráficas 5.6 y 5.7, se obtienen comportamientos diferentes para $T < T_0$ y $T > T_0$ respectivamente. Es claro que los resultados concuerdan con el comportamiento que se observa experimentalmente. Un esbozo de este comportamiento se da en la Gráfica 5.8. En este caso se observa además que el ordenamiento se da a una temperatura superior a

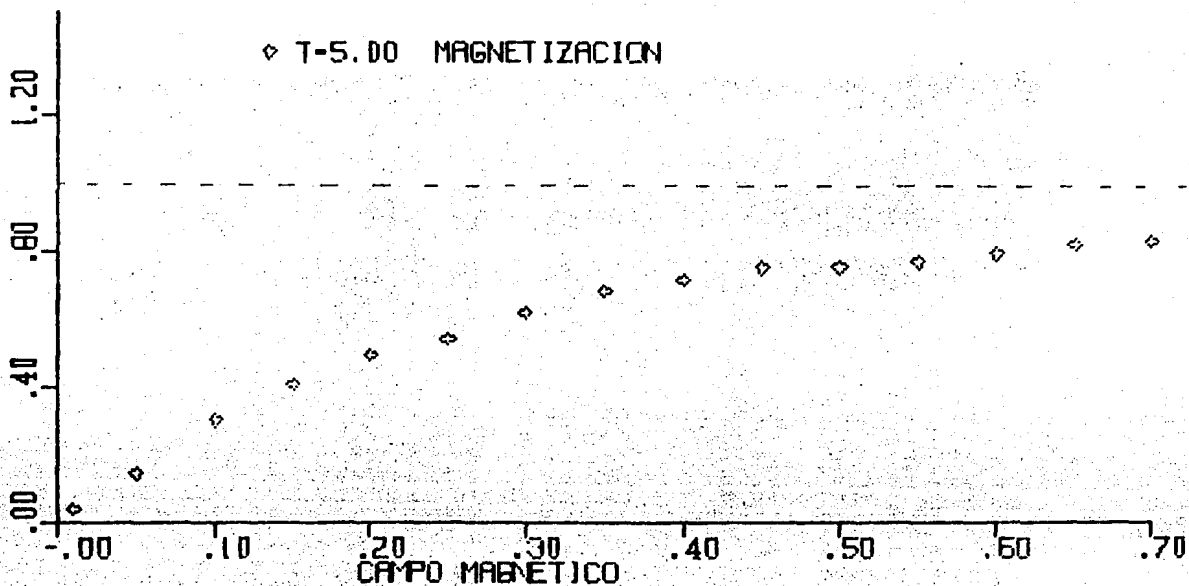
T_0 (ver Grafica 5.5).



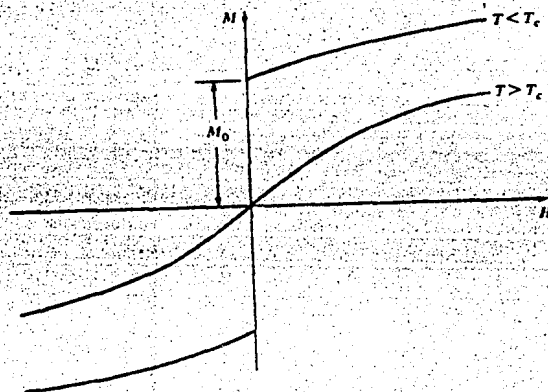
Grafica 5.5 Magnetización vs T (Ferromagnetismo, $B=0.200$).



Gráfica 5.6 Magnetización vs campo magnético
(Ferromagnetismo, $T < T_0$).



Gráfica 5.7 Magnetización vs campo magnético
(Ferromagnetismo, $T > T_0$).

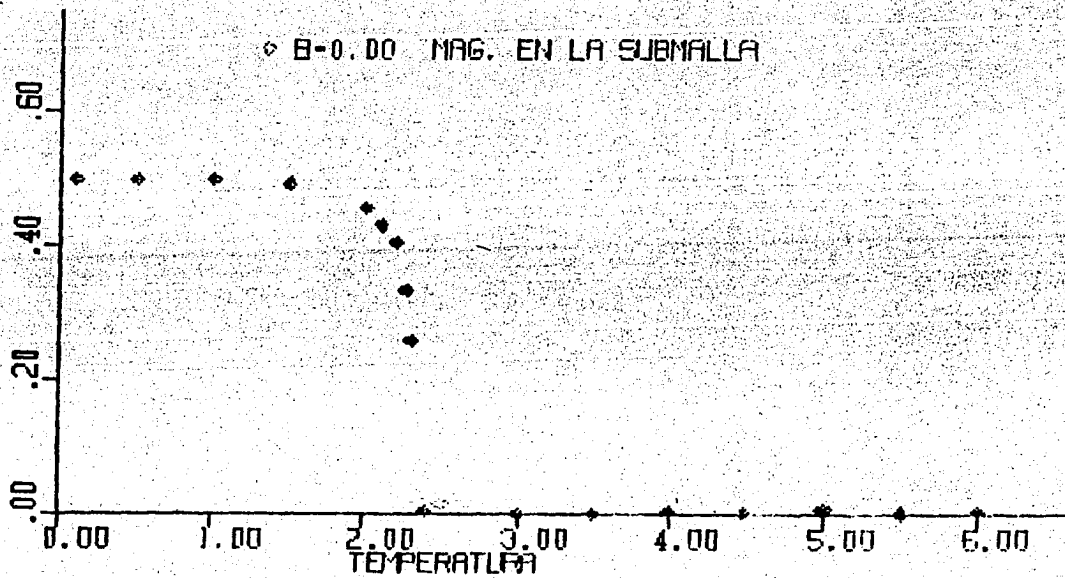


Gráfica 5.8 Magnetización vs campo magnético
(Ferromagnetismo, $B \neq 0$, 'experimental').

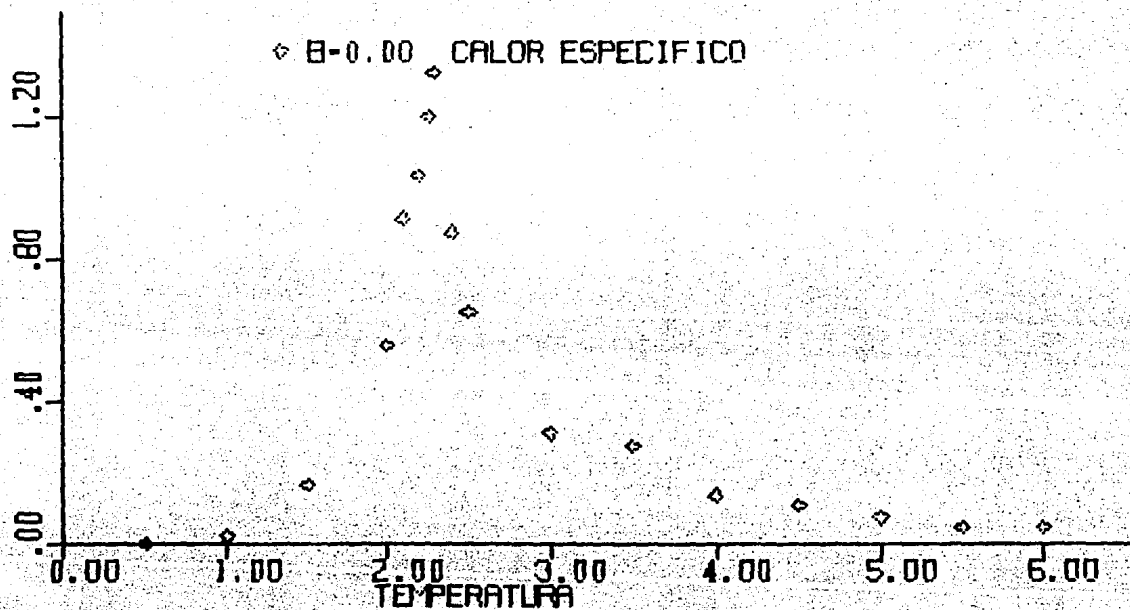
5.1.c Antiferromagnetismo sin campo magnético externo.

En este caso las observables calculadas son la energía, la magnetización en cada una de las subredes (así como su promedio) y la capacidad calorífica. Al igual que en el caso 5.1.a la magnetización cae a cero en una cierta temperatura T (Gráfica 5.9), la cual coincide con T_0 . El calor específico sigue teniendo un máximo, Gráfica 5.10, lo cual es una indicación de que las correlaciones de corto alcance aún están presentes.

En este caso el sistema muestra un ordenamiento a bajas temperaturas, mientras que en altas temperaturas muestra una fase paramagnética al igual que en el caso ferromagnético.



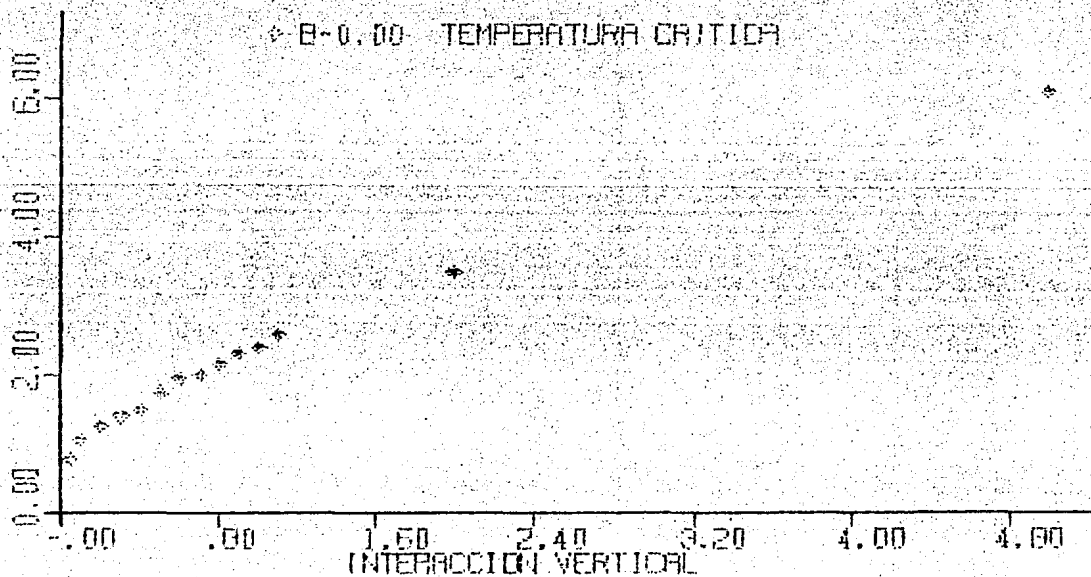
Gráfica 5.9 Magnetización vs T (Antiferromagnetismo con $B=0$).



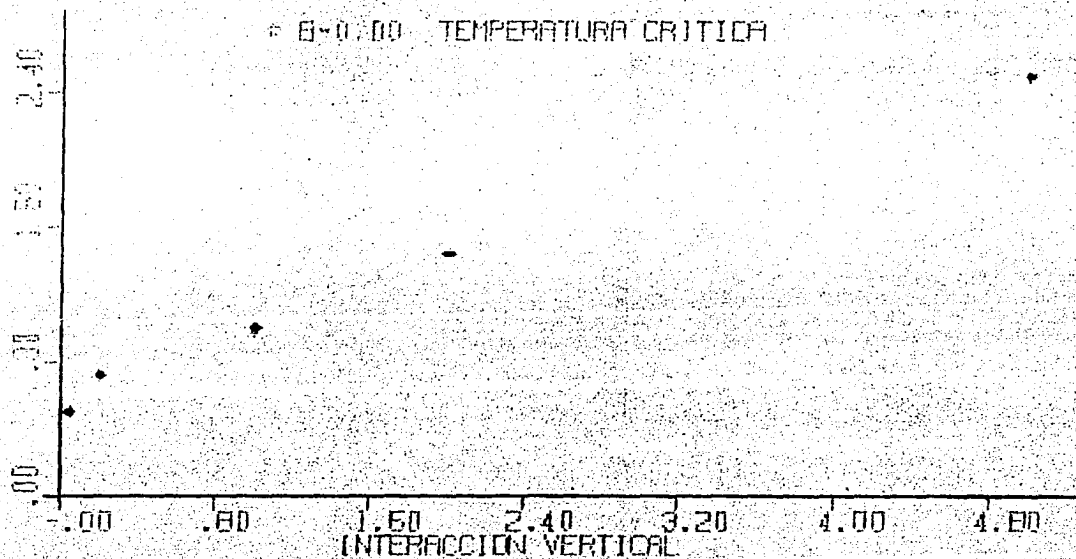
Gráfica 5.10 Capacidad calorífica vs T
(Antiferromagnetismo, $B=0$).

5.1.d Ferromagnetismo anisotrópico.

En este caso mas que analizar el comportamiento cualitativo del sistema, se estudia el comportamiento de la temperatura crítica cuando una de las interacciones entre los espines tiende a cero. El programa se corrió con diferentes valores de una de las interacciones, mientras que la otra permaneció constante. Los resultados obtenidos se muestran en la Gráfica 5.11 y se observa que, como se esperaba, la temperatura crítica tiende a cero cuando una de las interacciones va decreciendo hacia cero, que es el valor de la temperatura crítica en el caso unidimensional. El comportamiento observado concuerda, al menos cualitativamente, con los resultados reportados por Chang [Stanley, 1971] (Gráfica 5.12).



Gráfica 5.11 Temperatura crítica vs constante de interacción (Ferromagnetismo anisotrópico, $B=0$)



Gráfica 5.12 *Temperatura crítica vs constante de interacción [Chang].*

5.1.e Sistema con frustración.

El sistema que se estudió en este caso se muestra en la Figura 4.2, en la cual se observa que todas las plaquetas del sistema están frustradas. El comportamiento encontrado concuerda con lo esperado en el sentido de que por arriba de una cierta temperatura el sistema toma una serie de estados recurrentemente, lo cual es una indicación de que éste es incapaz de alcanzar su estado base y queda atrapado en este conjunto de estados. En altas temperaturas el sistema muestra una fase paramagnética, es decir existe una cierta temperatura que es capaz de desordenar al sistema aún cuando las plaquetas están frustradas. Es interesante estudiar además el comportamiento del sistema cuando éste presenta frustración diluida, es decir cuando no todas sus plaquetas están frustradas, lo cual puede hacerse sustituyendo enlaces negativos por enlaces positivos o bien aumentando el tamaño del sistema en proporción diferente a aquella en que aumentan los enlaces negativos. Sin embargo en este trabajo no nos ocuparemos de ello.

5.2 Conclusiones.

Al término de este trabajo podemos concluir que es posible implementar un programa que permita el estudio cualitativo y en ciertos aspectos cuantitativo de sistemas de muchos cuerpos que presentan comportamiento cooperativo, en particular de sistemas que presentan transiciones de fase y puntos críticos.

En el caso particular del modelo de Ising dos dimensiones, los

resultados obtenidos reflejan el comportamiento que establece la solución de Onsager. Existen diferencias apreciables que se deben a que el sistema que se modela es finito, pero existen evidencias de que los resultados mejoran cuando se incrementa el tamaño del sistema [Binder, 1979]. Por otro lado el programa implementado permite visualizar aspectos de comportamiento cooperativo cerca y lejos del punto crítico tales como:

1. Fluctuaciones.
2. Formación de dominios.
3. Distancia de correlación.
4. Efectos de un campo magnético externo, en el caso ferromagnético especialmente en el punto crítico.
- 5.- La aparición de una transición de primer orden.
5. Efectos de frustración.
6. Reducción dimensional causada por anisotropías.

Es conveniente ahora hacer algunos comentarios concernientes a las características de este y otros programas implementados con propósitos similares. Existe una gran cantidad de programas que a nivel de investigación se han implementado en grandes computadoras, ya que el principal objetivo es obtener resultados muy precisos. Esto representa una limitación, ya que no cualquier institución educativa cuenta con una de estas grandes computadoras. Se han diseñado entonces programas con fines didácticos que realicen este tipo de simulaciones. El único programa con que se contó para realizar comparaciones fué con uno diseñado para simular un ferromagneto con y sin campo magnético externo y que permite al observador interactuar

cambiando el estado termodinámico del sistema [Ercolese 1986] Este programa permite apreciar rápidamente los aspectos cualitativos mas no los cuantitativos, ya que no esta diseñado para calcular promedios.

Finalmente nos referiremos al tipo de trabajo que aun puede realizarse a partir de este programa. Entre los trabajos que es posible llevar a cabo se encuentran:

- 1).- La simulación del modelo de Ising tridimensional, aunque quizá entonces sea necesario trabajar en una máquina con mayor capacidad de memoria. En este caso hay que tener presente que el tiempo de máquina que se invierte en la simulación aumenta en proporción directa con el número de espines. El programa implementado invierte alrededor de 30 minutos en proporcionar los resultados para cada temperatura T dada cuando se trabaja con una red de 30×30 espines.
- 2).- La simulación de modelos en donde aparecen constantes de interacción aleatorias, como en los vidrios de espín.
- 3).- La simulación de un antiferromagneto en presencia de campos magnéticos.
- 4).- La simulación del modelo en presencia de campos magnéticos variables, que pueden ser periódicos, aleatorios, etc.
- 5).- El modelaje de otros sistemas, por ejemplo, emulsiones, micelas, aleaciones, fluidos multicomponentes, etc.
- 6).- La simulación de otros modelos que involucren cambios en el número de estados internos de los espines.
- 7).- El estudio cualitativo de las propiedades de escalamiento de tamaño finito.

BIBLIOGRAFIA.

ANDREWS, Th.

1869 *Phil. Trans. Roy. Soc. London* 197 II, 575.

BETHE, H.A.

1953 *Statistical Theory of superlattices, Proc. Roy. Soc. London* A150, 522.

BINDER, K.

1979 *Monte Carlo methods in statistical physics, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg N.Y.*

BRAGG, W. L.

1934 y WILLIAMS E. J., *Efect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys I, Proc. Roy. Soc. London* A145, 669.

1935 y WILLIAMS E. J., *Efect of tehermal agitation on atomic arrangement in alloys II, Proc. Roy. Soc. London* A151, 540.

BRICIO, H. D.

1984 y ALVAREZ, L. J. *El método de Monte Carlo, UAM.*

BRUSH, S. G.

1967 *History of the Lenz-Ising model, Rev. Mod. Phys.* 39, 833.

ERCOLESE, F.

1986 *Comunicación privada.*

GOPAL, E. S. R.

1976 Statistical mechanics and properties of matter, John Wiley and Sons.

GUGGENHEIM, E. A.

1954 The principle of corresponding states, *J. Chem. Phys.* 13, 253.

HERTZ, J.

1985 Disordered systems, *Physica Scripta* Vol T10, 1.

HURD, C. M.

1982 Varieties of magnetic order in solids, *Contemp. Phys.* 23, 469.

KRAMERS, H. A.

1941 y WANNIER, G. H., Statistics of the two dimensional ferromagnet I y II, *Phys. Rev.* 60, 252, 263.

KOONIN, S. E.

1985 Computational Physics, Benjamin Cummings Publishing Company Inc.

PEIERLS, R.

1936a Ising's model of ferromagnetism, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 32, 477.

1936b Statistical theory of superlattices with unequal concentrations of the components, *Proc. Roy. Soc. London* A154, 207.

REIF, F.

1965 Fundamentals of statistical and thermal physics, Mc. Graw-Hill,
Kogakusha Tokyo.

SENGERS, J. M. H. L.

1979 Liquidons and gasons; controversies about the continuity of states,
Physica 98A, 363.

STANLEY, H. E.

1971 Introduction to phase transitions and critical phenomena,
Clarendon Press Oxford.

STANLEY, H. E.

1986 Statphys 16 Invited lectures presented at the 16th conference of
Thermodynamics and Statistical Mechanics, Boston University August
1986.

THOMPSON, C. J.

1972 Mathematical statistical mechanics, Princeton University Press,
Princeton N. Y.

TOULOUSE, G.

1977 y PFEUTY, P., Introduction to the renormalization group and
critical phenomena, Wiley London.

VAN DER WAALS, J. D.

1873 *Ph. D.* Amsterdam.

WILSON, K. G.

1979 Problems in physics with many scales of length, *Scientific American* Vol 241 Number 2 August, 140.