

Universidad Nacional de Ingeniería

Facultad de Ciencias



TESIS

**Estudio del modelo de Ising en redes de dimensión  $d=2$  y  $3$ ,  
aplicando algoritmos de tipo clúster para la investigación de  
cristales ferromagnéticos**

Para obtener el Título Profesional de Licenciado en Física

Elaborado por

Herberth Gustavo Paucar Romero

 ORCID: 0009-0002-8877-8118

Asesor

Dr. Rosendo Ochoa Jiménez

 ORCID: 0000-0001-8672-1084

LIMA-PERÚ

2025

---

|                       |                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Citar/How to cite     | Paucar Romero [1]                                                                                                                                                                                                                                               |
| Referencia/Reference  | [1] H. Paucar Romero, “ <i>Estudio del modelo de Ising en redes de dimensión d=2 y 3, aplicando algoritmos de tipo clúster para la investigación de cristales ferromagnéticos</i> ” [Tesis de pregrado]. Lima (Perú): Universidad Nacional de Ingeniería, 2025. |
| Estilo/Style:<br>IEEE |                                                                                                                                                                                                                                                                 |

---



---

|                               |                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|-------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Citar/How to cite             | (Paucar, 2025)                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Referencia/Reference          | Paucar, H. (2025), <i>Estudio del modelo de Ising en redes de dimensión d=2 y 3, aplicando algoritmos de tipo clúster para la investigación de cristales ferromagnéticos</i> [Tesis de pregrado, Universidad Nacional de Ingeniería]. Repositorio Institucional UNI. |
| Estilo/Style:<br>APA(7ma ed.) |                                                                                                                                                                                                                                                                      |

---

## **Agradecimientos**

El presente trabajo no se habría podido realizar sin el apoyo de mis padres, padrinos, hermanos y demás familiares que me brindaron su apoyo, a quienes agradezco inmensamente.

También quiero reconocer el invaluable aporte del profesor Rosendo Ochoa Jiménez, gracias a cuya guía y vastos conocimientos se pudo concluir el presente trabajo.

## Resumen

En el presente trabajo se hace uso del modelo de Ising para estudiar transiciones de fase en diversas estructuras periódicas. En primer lugar se muestra de forma detallada la solución analítica, desarrollada por Kasteleyn et.al., de dicho modelo para una rejilla bidimensional cuadrada. En segundo lugar se usan los algoritmos de Wolff y de Swendsen-Wang para optimizar la simulación del modelo de Ising en estructuras cristalinas cúbicas simples (SC) y centradas en el cuerpo (BCC), y se relacionan los observables físicos como el calor específico y la susceptibilidad magnética, con magnitudes geométricas como el tamaño de ciertos colectivos de partículas.

Palabras clave: Modelo de Ising, Algoritmo de Wolff, Algoritmo de Swendsen-Wang, observables físicos, magnitudes geométricas.

## Abstract

In the present work we make use of model of Ising to study phase transitions in periodic structures. In the first place we show a detailed analitic solution for such model, provided by Kasteleyn et.al. for the case of a square lattice. In second place we use the algorithms of Wolff and Swendsen-Wang to improve simulations of Ising's Model in cubic lattices, specifically for SC and BCC crystals. Finally a comparison is established between physical observables, as specific heat and magnetic susceptibility, and geometric magnitudes as the average size of groups of particles.

Key words: Model of Ising, Algorithm of Wolff, Algorithm of Swendsen-Wang, Physical observables, Geometric magnitudes.

# Tabla de contenido

|                                                                              |           |
|------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| Resumen . . . . .                                                            | iv        |
| Abstract . . . . .                                                           | v         |
| Introducción . . . . .                                                       | xi        |
| <b>I. Fundamento Teórico</b>                                                 | <b>1</b>  |
| A. Magnetismo. . . . .                                                       | 1         |
| B. Ferromagnetismo. . . . .                                                  | 5         |
| 1. Fundamento cuántico. . . . .                                              | 6         |
| 2. Modelos macroscópicos. . . . .                                            | 10        |
| C. Transición de fase. . . . .                                               | 12        |
| 1. Exponentes críticos. . . . .                                              | 15        |
| D. Ruptura espontánea de simetría. . . . .                                   | 17        |
| 1. Ejemplo desde la mecánica clásica. . . . .                                | 19        |
| 2. Ejemplo desde la Teoría de campos. . . . .                                | 21        |
| <b>II. Modelo de Ising.</b>                                                  | <b>26</b> |
| A. Introducción. . . . .                                                     | 26        |
| 1. El modelo de Ising $d=0$ . . . . .                                        | 28        |
| 2. El modelo de Ising unidimensional ( $d=1$ ). . . . .                      | 28        |
| B. El modelo de Ising bidimensional ( $d=2$ ). . . . .                       | 29        |
| 1. Solución analítica en dimensión 2. . . . .                                | 30        |
| <b>III. Algoritmos.</b>                                                      | <b>45</b> |
| A. Enumeración de microestados. . . . .                                      | 45        |
| B. Algoritmos de Monte Carlo. . . . .                                        | 47        |
| 1. Método de muestra local. . . . .                                          | 48        |
| 2. Método clúster de Swendsen y Wang. . . . .                                | 50        |
| 3. Método clúster de Wolff. . . . .                                          | 55        |
| <b>IV. Aplicaciones de los algoritmos tipo clúster.</b>                      | <b>58</b> |
| A. Implementación de los códigos. . . . .                                    | 58        |
| 1. Algoritmo de Wolff en una red de dimensión $d=2$ . . . . .                | 58        |
| 2. Algoritmo de Wolff en una red tridimensional cúbica simple (SC). . . . .  | 60        |
| 3. Algoritmo de Swendsen y Wang en una red cúbica simple (SC). . . . .       | 61        |
| 4. Algoritmo de Wolff en una red cúbica centrada en el cuerpo (BCC). . . . . | 64        |
| B. Evaluación de los algoritmos. . . . .                                     | 65        |
| 1. Algoritmo de Wolff en una red cuadrada bidimensional. . . . .             | 65        |
| 2. El algoritmo de Wolff para un cristal SC. . . . .                         | 70        |
| 3. El algoritmo de Swendsen-Wang para un cristal SC. . . . .                 | 73        |
| 4. El algoritmo de Wolff para un cristal BCC. . . . .                        | 77        |
| C. Observaciones. . . . .                                                    | 78        |
| <b>V. Conclusiones.</b>                                                      | <b>81</b> |

|                             |           |
|-----------------------------|-----------|
| <b>VI. Recomendaciones.</b> | <b>82</b> |
| <b>VII. Bibliografía.</b>   | <b>83</b> |
| <b>Anexos</b>               | <b>85</b> |

## Lista de Tablas

|             |                                                                                                            |    |
|-------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabla I:    | Observables y sus exponentes críticos. . . . .                                                             | 17 |
| Tabla II:   | Algunos modelos y los valores de sus exponentes críticos, [14] p.14 . .                                    | 17 |
| Tabla III:  | N para las distintas energías E. . . . .                                                                   | 46 |
| Tabla IV:   | Valores de parámetros asociados al calor específico y la susceptibilidad magnética. . . . .                | 67 |
| Tabla V:    | Valores de parámetros asociados al calor específico para un ajuste logarítmico. . . . .                    | 68 |
| Tabla VI:   | Valores de parámetros asociados al calor específico y la susceptibilidad magnética. . . . .                | 69 |
| Tabla VII:  | Valores de parámetros asociados al calor específico para un ajuste logarítmico. . . . .                    | 70 |
| Tabla VIII: | Valores de parámetros asociados al calor específico, susceptibilidad magnética y la magnetización. . . . . | 73 |
| Tabla IX:   | Valores de $\alpha, \beta, \gamma$ . . . . .                                                               | 75 |
| Tabla X:    | Valor de $\xi$ . . . . .                                                                                   | 76 |

## Lista de Figuras

|                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |    |
|----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura I:      | Curva de histéresis de un ferromagneto. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                           | 5  |
| Figura II:     | Comportamiento de la magnetización para diversos valores del campo $\vec{B}$ , donde la flecha indica que el módulo del campo se incrementa (ver [5]p.90). . . . .                                                                                                                                                        | 11 |
| Figura III:    | En la izquierda los dominios tiene diversas direcciones y en la derecha están alineados. . . . .                                                                                                                                                                                                                          | 12 |
| Figura IV:     | Diagrama de fases del agua. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 13 |
| Figura V:      | Diagrama de fases del hierro. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 13 |
| Figura VI:     | Comportamiento de la magnetización de un ferromagneto. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                            | 14 |
| Figura VII:    | Diagrama de fases de Xenón, compare con Figura IV. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                | 16 |
| Figura VIII:   | Sistema anillo-cuenta. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 19 |
| Figura IX:     | Energía potencial $V$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 20 |
| Figura X:      | Ángulos $\phi$ y $\theta$ de los espines. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                         | 22 |
| Figura XI:     | El Potencial. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 23 |
| Figura XII:    | Un estado $\phi$ de energía mínima. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                               | 23 |
| Figura XIII:   | Ángulo $\phi$ en función de la posición. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                          | 24 |
| Figura XIV:    | Configuración de espines con $\phi(\xi) = 4 \arctan \exp(\sqrt{b}\xi)$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                          | 24 |
| Figura XV:     | Rejillas cuadrada y hexagonal. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 26 |
| Figura XVI:    | Los espines (+) se muestran de color rojo, los (-) de color azul, las paredes son uniones de segmentos verdes y $L := \#$ segmentos . En la esquina superior izquierda se muestra un dominio con un único espín (-) y $L = 4$ . Las otras dos configuraciones muestran dominios diferentes con el mismo $L = 8$ . . . . . | 27 |
| Figura XVII:   | Una posible configuración de espines. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                             | 30 |
| Figura XVIII:  | Fragmento de una rejilla cuadrada, donde el polígono izquierdo tiene 6 aristas horizontales y 6 verticales, mientras que el derecho tiene 10 aristas horizontales y 10 verticales. . . . .                                                                                                                                | 31 |
| Figura XIX:    | Un nodo se transforma en un clúster. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                              | 32 |
| Figura XX:     | Transformación de una rejilla cuadrada introduciendo clústeres. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                   | 33 |
| Figura XXI:    | Configuraciones de aristas cerradas alrededor de un nodo y sus contrapartes en un empaquetamiento de dímeros. . . . .                                                                                                                                                                                                     | 33 |
| Figura XXII:   | Rejilla orientada. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 34 |
| Figura XXIII:  | Enumeración sucesiva de configuraciones. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                          | 45 |
| Figura XXIV:   | $c_v$ vs. temperatura, $T_c \in [2, 2.5]$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                       | 47 |
| Figura XXV:    | $c_v$ vs. temperatura. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 50 |
| Figura XXVI:   | $\tau_{int}$ para diversos valores de $L$ , cuanto $T = T_C$ . Adaptado de [24]. . . . .                                                                                                                                                                                                                                  | 52 |
| Figura XXVII:  | Clústeres en una rejilla cuadrada. Las fronteras en verde separan clústeres dentro de un mismo clúster geométrico. . . . .                                                                                                                                                                                                | 53 |
| Figura XXVIII: | Calor específico vs. Temperatura [7]. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                             | 55 |
| Figura XXIX:   | Susceptibilidad vs. Temperatura, para rejillas con $L$ espines por lado [7]. . . . .                                                                                                                                                                                                                                      | 55 |

|                 |                                                                                                                                                                         |    |
|-----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura XXX:     | $\tau$ vs $L$ . Adaptado de [24]. . . . .                                                                                                                               | 57 |
| Figura XXXI:    | Las 4 partes consecutivas del algoritmo. . . . .                                                                                                                        | 59 |
| Figura XXXII:   | Fragmento de una red SC. . . . .                                                                                                                                        | 60 |
| Figura XXXIII:  | Fragmento de una red BCC. . . . .                                                                                                                                       | 64 |
| Figura XXXIV:   | Constantes de intercambio del hierro BCC para las primeras 10 capas ([20] Tabla 1.) . . . . .                                                                           | 64 |
| Figura XXXV:    | Calor específico y susceptibilidad magnética para un amplio rango de temperaturas. . . . .                                                                              | 65 |
| Figura XXXVI:   | La temperatura crítica pertenece a la intersección de la barra amarilla y el eje de temperaturas, por ello aproximadamente $T_c = 2.32$ . . . . .                       | 66 |
| Figura XXXVII:  | El comportamiento del calor específico en función de $t$ , a la izquierda para temperaturas en $I_1$ y a la derecha para temperaturas en $I_2$ . . . . .                | 67 |
| Figura XXXVIII: | La susceptibilidad magnética en función de $t$ , a la izquierda para temperaturas en $I_1$ y a la derecha para temperaturas pertenecientes a $I_2$ . . . . .            | 67 |
| Figura XXXIX:   | Calor específico vs $t$ , en la izquierda para temperaturas en $I_1$ y en la derecha para temperaturas en $I_2$ . . . . .                                               | 68 |
| Figura XL:      | Calor específico vs $t$ , en la izquierda para temperaturas cercanas a $T_c$ . . . . .                                                                                  | 68 |
| Figura XLI:     | Calor específico vs $t$ , en la izquierda para temperaturas en $I_1$ y en la derecha para temperaturas en $I_2$ . . . . .                                               | 69 |
| Figura XLII:    | Susceptibilidad magnética vs $t$ , en la izquierda para temperaturas en $I_1$ y en la derecha para temperaturas en $I_2$ . . . . .                                      | 69 |
| Figura XLIII:   | Calor específico vs $t$ , en la izquierda para temperaturas en $I_1$ y en la derecha para temperaturas en $I_2$ . . . . .                                               | 70 |
| Figura XLIV:    | De arriba a abajo, gráficas del calor específico, susceptibilidad magnética y varianza del tamaño relativo del clúster respecto de la temperatura. . . . .              | 71 |
| Figura XLV:     | Gráficas del calor específico, la susceptibilidad magnética y la magnetización absoluta en función de la temperatura. . . . .                                           | 72 |
| Figura XLVI:    | Calor específico en función de $t = \frac{ T-T_c }{T_c}$ , para $T$ en $I_1$ (izquierda) e $I_2$ (derecha). . . . .                                                     | 72 |
| Figura XLVII:   | Susceptibilidad magnética para temperaturas en $I_1$ (izquierda) y $I_2$ (derecha). . . . .                                                                             | 73 |
| Figura XLVIII:  | Magnetización para temperaturas en $I_1$ . . . . .                                                                                                                      | 73 |
| Figura XLIX:    | Calor específico y susceptibilidad magnética. . . . .                                                                                                                   | 74 |
| Figura L:       | Ajuste de curvas para el calor específico, la susceptibilidad magnética y la magnetización en función de $t = \frac{T_c-T}{T_c}$ , para temperaturas en $I_1$ . . . . . | 74 |
| Figura LI:      | Comparación entre la magnetización y el tamaño del mayor clúster, en función de $\frac{T}{T_c}$ , donde $T \in I$ . . . . .                                             | 75 |
| Figura LII:     | Comparación entre la susceptibilidad magnética y la varianza del tamaño del mayor clúster, para diversas temperaturas $T \in I$ . . . . .                               | 76 |
| Figura LIII:    | Varianza del tamaño del clúster mayor en función de $t = \frac{T_c-T}{T_c}$ , donde $T \in I_1$ . . . . .                                                               | 76 |
| Figura LIV:     | Calor específico y susceptibilidad magnética para diversas temperaturas - 1. . . . .                                                                                    | 77 |
| Figura LV:      | Calor específico y susceptibilidad magnética para diversas temperaturas - 2. . . . .                                                                                    | 77 |
| Figura LVI:     | Calor específico y susceptibilidad magnética para diversas temperaturas - 3. . . . .                                                                                    | 78 |

## Introducción

La presente tesis se orienta al estudio de ciertos materiales ferromagnéticos, usando el modelo de Ising, desde dos ángulos: una analítica-matemática y una computacional. En el primer enfoque se usan herramientas como el álgebra lineal, teoría de variable compleja y probabilidad, así como ideas de la física estadística. En la segunda perspectiva se usan dos algoritmos Markovianos para potenciar las simulaciones del comportamiento de tales sistemas.

El modelo bidimensional de Ising, también conocido como el modelo de Onsager, simplifica la interacción de los espines en una red cuadrada bidimensional y busca describir la estructura de un material ferromagnético. Este arquetipo tiene la valiosa propiedad de poder ser estudiado analíticamente, es decir usando herramientas matemáticas se pueden obtener expresiones exactas de objetos como la función de partición, las energías libres, el calor específico, etc. El desarrollo riguroso de tal análisis fue trabajado en primer lugar por Onsager (1944), mas en el presente texto se muestra el método exhibido por B.M.McCoy y T.T.Wu [18], que está basado a su vez en el trabajo de Kasteleyn et.al.[13].

Debido a que las estructuras cristalinas son tridimensionales, es natural tratar de usar el modelo de Ising en este caso, pero los intentos de un desarrollo analítico han fracasado. Por tal motivo las investigaciones se han enfocado en simular computacionalmente el modelo, obteniendo magnitudes aproximadas. Haciendo una regresión, han habido muchos trabajos que simulan el modelo de Onsager, por ejemplo usando un algoritmo del tipo muestra local [23] o uno del tipo clúster [15],[7]. Usando lo anterior como aliciente, en el presente trabajo se estudia el modelo de Ising en estructuras tridimensionales, en específico redes cúbicas simples y cúbicas centradas en el cuerpo, usando para ello algoritmos de Montecarlo del tipo clúster, esto es con iteraciones aleatorias que invierten el signo de colectivos de espines. Adicionalmente se busca establecer conexiones entre magnitudes físicas como la susceptibilidad magnética, el calor específico y la magnetización con magnitudes geométricas o percolativas, como la media y la varianza del tamaño de los clústeres creados en la simulación.

La tesis está organizada de la siguiente manera: Se inicia presentando un resumen teórico del magnetismo en el vacío así como su interacción con la materia ([12],[21]), posteriormente se expone la naturaleza cuántica del ferromagnetismo ([1],[17],[5]). En seguida se introducen las transiciones de fase, fenómenos que motivaron la invención del modelo de Ising, y se hace incapié en las rupturas de simetría ya que proporcionan una profunda comprensión física de los cambios de fase ([22],[4],[14],[16]).

En el segundo capítulo se hace la presentación formal del modelo de Ising bidimensional y se expone de manera detallada la solución propuesta en [18], fundamentándose en la teoría de dímeros estudiada por Kasteleyn. Se demuestra que, en el límite termodinámico, la función de partición no es analítica en una temperatura, además el calor específico diverge logarítmicamente en ese punto.

En el siguiente capítulo se presentan los diversos algoritmos para simular el modelo de

Ising, desde el algoritmo de muestreo directo que considera configuraciones independientes, pasando por el de muestreo local que invierte el signo de un espín a la vez ([23]), hasta llegar a los de tipo clúster que usan cadenas de Markov para obtener sucesivas configuraciones, invirtiendo el signo de familias de espines ([15], [7],[25]). Estos algoritmos son los de Swendsen-Wang y el de Wolff.

En el capítulo 4 se exponen los códigos, en Python, de los algoritmos de Swendsen y Wang y de Wolff, para redes bidimensionales cuadradas y redes cúbicas simples y centradas en el cuerpo. En el primer caso se usa como base el trabajo de Heusinkveld (ver [https://github.com/VHeusinkveld/Ising\\_Model-CP2/blob/master/Ising\\_simulation.py](https://github.com/VHeusinkveld/Ising_Model-CP2/blob/master/Ising_simulation.py)), mientras que en el segundo los códigos se fundamentan en el trabajo de Krauth et.al.([15]). Posteriormente se muestran los resultados de ejecutar dichos códigos, en específico se muestran las temperaturas críticas estimadas, el comportamiento del calor específico, la susceptibilidad y la magnetización así como sus exponentes críticos respectivos. También se incluye el comportamiento del tamaño medio de los clústeres así como su varianza, y se trazan paralelismos entre éstas y las magnitudes físicas mencionadas.

Finalmente en el Apéndice se hace un breve resumen de las herramientas matemáticas y físicas usadas en el desarrollo de los capítulos precedentes, y lo que es más importante, se muestran los códigos explícitos en Python de los algoritmos, en diversos tipos de redes.

## I. Fundamento Teórico

En el presente capítulo se hace una breve introducción de la teoría del comportamiento magnético, en particular del ferromagnetismo, además se presentan los fundamentos de las transiciones de fase.

### A. Magnetismo.

El fenómeno físico denominado magnetismo es experimentado diariamente, ya sea en las brújulas, en los adornos de refrigeradoras o incluso en máquinas de resonancia magnética. Pero los fundamentos de cómo se produce dicho fenómeno no se comprendieron en profundidad hasta hace poco más de un siglo con el advenimiento de la mecánica cuántica.

Desde muchos siglos atrás se ha observado que algunos objetos, denominados *imanes*, influían sobre ciertos materiales en sus inmediaciones, es decir creaban un tipo de perturbación o campo a su alrededor, cuya naturaleza fue esquivada por mucho tiempo. Además se notó que estos objetos tenían dos polos (*dipolos magnéticos*), a los que se denominó polo sur y norte, que se manifestaban al acercar dos imanes aledaños, de manera que dependiendo de su orientación estos se atraían o repelían, además no se podían crear imanes de un único polo. Oersted (siglo XIX) estudiando un imán notó que una corriente eléctrica circulando por un cable adyacente perturbaba su orientación, lo cual demostró que una corriente eléctrica se comporta como un imán, perturbando el espacio a su alrededor como lo haría un imán.

Las cargas eléctricas influyen en su entorno a través de un campo eléctrico  $\vec{E}$ , y si forman corrientes entonces lo hacen además mediante un campo magnético  $\vec{B}$ , de manera que la fuerza que ejercen sobre una partícula cargada en movimiento es

$$\vec{F} = q \vec{E} + q \vec{v} \times \vec{B}, \quad (\text{I.1})$$

donde  $q$  es la carga de la partícula y  $\vec{v}$  su velocidad. El campo eléctrico está asociado a un potencial  $\Phi$  mediante

$$\vec{E} = -\nabla\Phi,$$

y basándose en experimentos y razonamientos abstractos, se sabe que en el vacío el potencial verifica

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V \frac{\rho(\vec{r}')}{|\Delta\vec{r}|} d\vec{r}',$$

donde las cargas ocupan un volumen  $V$ ,  $\rho$  es la densidad de cargas en la posición  $\vec{r}'$  y se considera independiente del tiempo,  $\Delta\vec{r} = \vec{r} - \vec{r}'$  y  $\epsilon_0$  es la permitividad del vacío. Si se hace una ex-

pansión binomial del término  $|\Delta\vec{r}|$  se tiene que el potencial *electrostático*  $\Phi$  es igual a

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{1}{|\vec{r}|} \int_V \rho(\vec{r}') d\vec{r}' + \frac{1}{|\vec{r}|^3} \int_V \vec{r} \cdot \vec{r}' \rho(\vec{r}') d\vec{r}' + \frac{1}{2|\vec{r}|^5} \int_V \left( 3(\vec{r} \cdot \vec{r}')^2 - |\vec{r}|^2 |\vec{r}'|^2 \right) \rho(\vec{r}') d\vec{r}' + \dots \right], \quad (\text{I.2})$$

de manera tal que el primer sumando se considera como la contribución de un monopolo eléctrico, el segundo de un dipolo, el tercero de un cuadrupolo, etc, todos centrados en el origen.

De lo anterior se obtiene la siguiente expresión del campo electrostático:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3} p_0 + \frac{3\vec{r}(\vec{r} \cdot \vec{p}) - |\vec{r}|^2 \vec{p}}{|\vec{r}|^5} + \dots \right],$$

donde  $p_0 = \int_V \rho(\vec{r}') d\vec{r}'$  es el momento monopolar eléctrico,  $\vec{p} = \int_V \vec{r}' \rho(\vec{r}') d\vec{r}'$  es el momento dipolar eléctrico, etc. La unidad del campo eléctrico es el Volt por metro  $\frac{V}{m}$ .

En el caso del campo magnético en el vacío el planteamiento es parecido, pero en lugar de un potencial escalar se requiere de uno vectorial  $\vec{A}$  de manera que

$$\nabla \times \vec{A} = \vec{B}.$$

Se considera una corriente que fluye estacionariamente dentro de un volumen  $V$ , en otras palabras la densidad de corriente  $\vec{J}$  satisface

$$\nabla \cdot \vec{J} = 0, \quad (\text{I.3})$$

además si  $\partial V$  denota la frontera de  $V$ , es razonable considerar que  $\hat{n} \cdot \vec{J} = 0$  con  $\hat{n}$  un vector normal a la superficie  $\partial V$ . Por otro lado el potencial *magnetostático*  $\vec{A}$  tiene la forma

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\vec{J}(\vec{r}')}{|\Delta\vec{r}|} d\vec{r}',$$

donde  $\Delta\vec{r} = \vec{r} - \vec{r}'$  y  $\mu_0$  es la permeabilidad magnética del vacío. Al realizar una expansión binomial del divisor en la integral previa se obtiene

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[ \frac{1}{|\vec{r}|} \int_V \vec{J}(\vec{r}') d\vec{r}' + \frac{1}{|\vec{r}|^3} \int_V \vec{J}(\vec{r}') \vec{r} \cdot \vec{r}' d\vec{r}' + \frac{1}{2|\vec{r}|^5} \int_V \vec{J}(\vec{r}') \left( 3(\vec{r} \cdot \vec{r}')^2 - |\vec{r}|^2 |\vec{r}'|^2 \right) d\vec{r}' + \dots \right]. \quad (\text{I.4})$$

El primer sumando de I.4 es de interés, debido a que mostraría un análogo al monopolo eléctrico, mas debido a la ecuación I.3 y la condición sobre la frontera se tiene que para  $i \in \{1, 2, 3\}$

$$\int_V \vec{J}_i(\vec{r}') d\vec{r}' = \int_V \nabla \cdot (r'_i \vec{J}(\vec{r}')) d\vec{r}' = \int_{\partial V} r'_i \hat{n} \cdot \vec{J}(\vec{r}') ds = 0,$$

se deduce que los monopolos magnéticos no pueden existir, al menos dentro de la estructura teórica presentada. En lo concerniente a los demás sumandos, estos se pueden transformar algebraicamente para obtener

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[ \frac{1}{|\vec{r}|^3} \vec{m} \times \vec{r} + \frac{1}{2|\vec{r}|^5} \left( \epsilon_{ijl} (3r_k r_l - |\vec{r}|^2 \delta_{kl}) m_{jk}^{(2)} \right)_i + \dots \right], \quad (\text{I.5})$$

donde  $\epsilon_{ijl}$  es el épsilon de Levi-Civita y se usa la convención de que subíndices repetidos implican una suma, asimismo

$$\vec{m} = \frac{1}{2} \int_V \vec{r}' \times \vec{J}(\vec{r}') d\vec{r}'$$

es el momento del dipolo magnético, además

$$m_{ij}^{(2)} = \frac{2}{3} \int_V (\vec{r}' \times \vec{J}(\vec{r}'))_i r'_j d\vec{r}'$$

es una entrada del momento del cuadripolo magnético  $\vec{m}^{(2)}$ , etc. Por lo expuesto se aprecia que, a diferencia del potencial eléctrico, la expansión del potencial magnético empieza con el término dipolar y este es dominante en lugares alejados de la corriente.

A partir de la definición del potencial  $\vec{A}$ , se procede a hallar el campo magnético (inducción magnética)

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[ \frac{3(\vec{r} \cdot \vec{m})\vec{r} - |\vec{r}|^2 \vec{m}}{|\vec{r}|^5} \right. \quad (\text{I..6})$$

$$\left. + \frac{3}{2|\vec{r}|^7} \left( \{5r_i r_j r_k - |\vec{r}|^2 (r_i \delta_{jk} + r_j \delta_{ik} + r_k \delta_{ij})\} m_{jk}^{(2)} \right)_i + \dots \right] \quad (\text{I..7})$$

La unidad del campo magnético es el Tesla  $T$ .

El siguiente asunto de interés es analizar los efectos de un campo  $\vec{B}$  sobre una corriente eléctrica, en particular la fuerza que ejerce sobre aquella, por ello partiendo de la ecuación I..1 y asumiendo que  $\vec{B}$  varía suavemente, se deduce que

$$\vec{F} = (\vec{m} \cdot \nabla) \vec{B} + \frac{1}{2} (m_{jk}^{(2)} \nabla_j \nabla_k \vec{B}_i)_i + \dots,$$

donde  $\vec{m}, \vec{m}^{(2)}, \dots$  son los momentos de la corriente (momento dipolar, cuadripolar, etc). Basándose en lo previo se puede calcular la energía de una corriente eléctrica debido a su interacción con un campo magnético externo.

$$W = -\vec{m} \cdot \vec{B} - \frac{1}{2} m_{ij}^{(2)} \nabla_j B_i - \dots \quad (\text{I..8})$$

Lo expuesto anteriormente se puede condensar en las dos célebres ecuaciones de la *magnetostática en el vacío*

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{B} &= 0, \\ \nabla \times \vec{B} &= \mu_0 \vec{J}. \end{aligned} \quad (\text{I..9})$$

El estudio anterior, es decir en el vacío, se puede interpretar como un estudio microscópico, donde algunos electrones circulan creando campos magnéticos en el espacio vacío circundante. Para un estudio macroscópico del magnetismo, donde miríadas de partículas cargadas circulan y crean campos que interactúan con otras tantas, los promedios de las diversas magnitudes adquieren un papel preponderante. Desde un punto de vista informal, si  $\vec{B}$  denota la inducción magnética total debido a las múltiples corrientes eléctricas y a los momentos magnéticos de las moléculas, entonces la primera ecuación de (I..9) debe mantenerse

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0,$$

ya que cada punto del espacio actúa como fuente y sumidero de líneas de flujo magnético.

En primer lugar se considera que los campos producidos por los átomos y moléculas provienen de los momentos dipolares  $\vec{m}$ , de manera que si  $N_i$  es el número promedio por unidad de volumen de moléculas de tipo  $i$ , además  $\langle m_i \rangle$  es el promedio de los momentos de las moléculas de dicha clase en las inmediaciones de la posición  $\vec{x}$ , entonces se define la magnetización como

$$\vec{M} = \sum N_i \langle m_i \rangle .$$

Si existe una corriente eléctrica macroscópica  $\vec{J}$  debido a cargas libres, el potencial vectorial es igual a

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \left[ \frac{\vec{J}(\vec{r}')}{|\Delta\vec{r}|} + \frac{\vec{M}(\vec{r}') \times \Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|^3} \right] d\vec{r}' = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \left[ \frac{\vec{J}(\vec{r}') + \nabla \times \vec{M}(\vec{r}')}{|\Delta\vec{r}|} \right] d\vec{r}'$$

donde se aprecia que la magnetización contribuye mediante una *densidad de corriente efectiva*  $\vec{J}'$

$$\vec{J}' = \nabla \times \vec{M},$$

de manera que la segunda ecuación en (I..9) tiene como contraparte a

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0(\vec{J} + \nabla \times \vec{M}).$$

Se define un nuevo campo vectorial

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M},$$

con el cual se construyen las ecuaciones de la magnetostática en la materia

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{B} &= 0, \\ \nabla \times \vec{H} &= \mu_0 \vec{J}. \end{aligned} \tag{I..10}$$

Haciendo una breve recapitulación se observa que en el vacío los campos  $\vec{B}$  y  $\vec{H}$  se relacionan entre sí mediante la ecuación

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H},$$

es decir son linealmente dependientes. En cuanto al comportamiento en la materia, en el caso particular en que  $\vec{M}$  y  $\vec{H}$  son paralelos, esto es en un *material lineal*, se tiene

$$\vec{M} = \chi \vec{H},$$

donde  $\chi$  es la *susceptibilidad magnética* del objeto, con lo cual se tiene

$$\vec{B} = \mu_0(1 + \chi)\vec{H} = \mu_0\mu_r\vec{H},$$

con  $\mu_r$  la permeabilidad relativa del material.

La susceptibilidad  $\chi$  cuantifica el cambio en la magnetización de un material en función del campo aplicado. Si  $\chi > 0$  entonces  $\vec{M}$  se alinea con  $\vec{H}$  y el material se denomina *paramagnético*, por otro lado si  $\chi < 0$  entonces  $\vec{M}$  es antiparalelo a  $\vec{H}$  y el objeto es llamado *diamagnético*, en ambos casos los valores absolutos de  $\chi$  suelen ser mucho menores que 1 (del orden  $10^{-5}$ ), pero existen materiales con valores mucho mayores, como se muestra en la siguiente subsección.

## B. Ferromagnetismo.

En la naturaleza existen algunos materiales que presentan magnetización no nula a ciertas temperaturas, incluso cuando prácticamente no existen campos magnéticos externos. Estos materiales, también denominados **ferromagnetos**, también se caracterizan por presentar una susceptibilidad  $\chi > 0$  muy grande, del orden de  $10^3 - 10^5$ . Además tienen la propiedad de conservar una magnetización al ser sometidos a campos externos, aun cuando previamente no la tenían, hecho que se muestra en el siguiente gráfico.

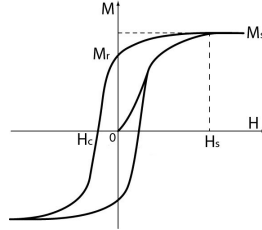


Figura I: Curva de histéresis de un ferromagneto.

La figura I muestra la evolución de la magnetización  $\vec{M}$  de un ferromagneto al ser sometido a un campo externo. Inicialmente  $\vec{M} = 0$ , luego el campo  $\vec{H}$  aumenta y también lo hace la magnetización en la misma dirección, aunque no de forma lineal hasta alcanzar un módulo máximo  $M_s$ , posteriormente  $\vec{H}$  decrece pero al alcanzar el valor 0 el material presenta una magnetización residual  $M_r$  que desaparece si el campo invierte su dirección y aumenta su módulo. La explicación empírica (mediante el efecto Kerr o los patrones Bitter, ver [1] p.60-61) de este comportamiento yace en los *dominios magnéticos*, los cuales son regiones del material con una magnetización común, de tal forma que al inicio ( $\vec{H} = 0$ ) estas se compensan entre sí produciendo una magnetización total nula, posteriormente al incrementarse  $\vec{H}$  los dominios se alinean con aquel, dando lugar a una magnetización no nula (ver figura III).

En la sección previa se introdujo el magnetismo usando herramientas de la física clásica, específicamente se apreció cómo las corrientes eléctricas generan campos magnéticos  $\vec{B}$ , motivo por el cual a continuación se trata de explicar el ferromagnetismo en los mismos términos. Considérese un conjunto de electrones, girando alrededor de sus respectivos núcleos atómicos, generando pequeños dipolos magnéticos con sus respectivos momentos magnéticos, de manera que al considerar todos los electrones se tiene un momento magnético neto  $\vec{m}$ . Si se aplica un campo magnético externo  $\vec{B}$ , se tiene (ver I.8) que la energía  $E$  del sistema cumple

$$E = -\vec{m} \cdot \vec{B},$$

posteriormente teniendo en consideración que la magnetización  $\vec{M}$  es el momento magnético  $\vec{m}$  por unidad de volumen, de la relación precedente se observa que  $\vec{M}$  depende de la tasa de cambio de la energía respecto al campo magnético. Pero en este punto sucede algo inesperado: Por la ecuación I.1 el campo  $\vec{B}$  produce una fuerza perpendicular a la velocidad, por lo tanto realiza trabajo nulo, y por ello la energía del sistema no depende del campo aplicado, por ello  $\vec{M} = 0$ , esto implica que la teoría clásica es incapaz de explicar la aparición de la magnetización en los materiales ferromagnéticos.

Para terminar de confirmar la hipótesis de que una nueva teoría era necesaria para explicar el ferromagnetismo, la mecánica estadística clásica tampoco es capaz de dilucidar este fenómeno, lo cual queda patente en el teorema de Bohr-van Leeuwen: La función de partición de  $N$  partículas a temperatura  $T$ , cada una con masa  $m$  y carga  $q$ , es proporcional a

$$\int \dots \int \exp(-\beta E(\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\})) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N,$$

donde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B$  es la constante de Boltzmann e  $1 \leq i \leq N$ . La energía

$$E(\{r_i, p_i\}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2m} (p_i(j))^2 + qV(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

está asociada a la configuración donde la  $i$ -ésima partícula esta en la posición  $\vec{r}_i = (r_i(1), r_i(2), r_i(3))$  y tiene momento  $\vec{p}_i = (p_i(1), p_i(2), p_i(3))$ ,  $i \leq N$ . La acción de un campo magnético  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  sobre el momento de las partículas con carga  $q$  es adicionarle el vector  $q\vec{A}$ , pasando de  $\vec{p}_i$  a  $\vec{p}_i + q\vec{A}$ , por lo que al reemplazar este nuevo momento en la integral anterior, esta no cambia ya que los límites de integración son  $\pm\infty$ , por ello la función de partición es independiente del campo magnético, por lo tanto también lo será la energía libre de Gibbs, por lo cual se deduce que la magnetización es nula.

## 1. Fundamento cuántico.

Como se aprecia en la subsección precedente, los argumentos de la física clásica son insuficientes para explicar la naturaleza del magnetismo, motivo por el cual es necesaria una nueva perspectiva.

Por la mecánica cuántica se sabe que las diversas magnitudes medibles como la posición, el momentum, la energía, etc, están asociados a operadores algebraicos que actúan sobre espacios de Hilbert donde habitan las funciones de onda  $\psi$ , las cuales caracterizan el estado cuántico de las partículas. Para estudiar un sistema compuesto por un núcleo atómico y un electrón, el cual está sometido a un potencial eléctrico  $\Phi$  y a un campo magnético  $\vec{B}$  (con un operador potencial vectorial  $\hat{A}$ ) constante de tal manera que se se puede elegir  $\hat{A} = \frac{\vec{B} \times \hat{r}}{2}$ , donde además las velocidades involucradas son mucho menores a la velocidad de la luz, el Hamiltoniano apropiado se muestra a continuación en la célebre *ecuación de Pauli*

$$\left[ \frac{(\hat{p} - e\hat{A})^2}{2m_e} - \frac{e}{m_e} \hat{S} \cdot \vec{B} + e\Phi \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi,$$

donde  $\hat{p}$  es el operador momentum y  $\hat{S}$  el operador espín.

Como el campo magnético es uniforme, con un poco de álgebra se puede desarrollar la expresión anterior.

$$\begin{aligned} (\hat{p} - e\vec{A})^2 &= \hat{p}^2 - e\hat{p} \cdot \hat{A} - e\hat{A} \cdot \hat{p} + e^2 \hat{A} \cdot \hat{A} \\ &= \hat{p}^2 - \frac{e}{2} \left( \hat{p} \cdot (\vec{B} \times \hat{r}) + (\vec{B} \times \hat{r}) \cdot \hat{p} \right) + \frac{e^2}{4} (\vec{B} \times \hat{r}) \cdot (\vec{B} \times \hat{r}) \\ &= \hat{p}^2 - \frac{e}{2} \left( \vec{B} \cdot (\hat{r} \times \hat{p}) - (\hat{p} \times \hat{r}) \cdot \vec{B} \right) + \frac{e^2}{4} ((\vec{B} \times \hat{r})^2) \\ &= \hat{p}^2 - e\hat{L} \cdot \vec{B} + \frac{e^2}{4} (\vec{B} \times \hat{r})^2, \end{aligned}$$

con  $\hat{L}$  el operador momento angular, por lo tanto la ecuación de Pauli adquiere la siguiente forma

$$\left[ \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + e\Phi - \frac{e}{2m_e} (\hat{L} + 2\hat{S}) \cdot \vec{B} + \frac{e^2}{8m_e} (\vec{B} \times \hat{r})^2 \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (\text{I..11})$$

De la ecuación anterior se observa que el Hamiltoniano es igual a  $\frac{\hat{p}^2}{2m_e} + e\Phi$  más dos perturbaciones, la primera,  $\frac{e}{2m_e} (\hat{L} + 2\hat{S}) \cdot \vec{B}$ , se denomina el *término paramagnético* y la

segunda,  $\frac{e^2}{8m_e}(\vec{B} \times \hat{r})^2$ , el *término diamagnético*.

Hasta este momento se han considerado a los átomos como entes aislados, sin interacción entre ellos, siendo ésta fundamental en el ferromagnetismo, como se demuestra a continuación. La primera opción a considerar es la interacción entre dos dipolos magnéticos con momentos  $\vec{m}_1$  y  $\vec{m}_2$  separados por una distancia  $\vec{r}$ , entonces la energía del sistema (ver I..6 y I..8) es

$$\frac{\mu_0}{4\pi|\vec{r}|^3}(\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 - \frac{3}{|\vec{r}|^2}(\vec{m}_1 \cdot \vec{r})(\vec{m}_2 \cdot \vec{r})), \quad (\text{I..12})$$

por lo tanto dos dipolos con momentos magnéticos del orden de  $1\mu_B$  y alejados entre sí una distancia  $\sim 1\text{\AA}$  tienen una energía similar a  $10^{-23}J$  que corresponde a una temperatura del orden de  $1K$ , muy alejada de las temperaturas críticas de materiales como el hierro; y por añadidura se favorece que los dipolos sean antiparalelos.

Lo visto anteriormente conlleva a un análisis más profundo, cuyo primer paso es observar que debido a su espín, los electrones poseen un mayor grado de libertad, y por lo tanto la energía de un sistema de electrones depende de sus espines, incluso cuando no hay un campo magnético externo (como en la ecuación I..11). La forma en la que los espines ejercen influencia sobre la energía del sistema se basa en el principio de exclusión de Pauli, esto es si dos electrones tienen sus espines paralelos entonces deben estar alejados y por lo tanto su energía potencial eléctrica  $E_p$  debe ser pequeña, mientras que si tienen sus espines antiparalelos entonces pueden estar cerca y su energía potencial  $E_a$  es mayor, con lo cual se define la energía de intercambio como

$$E_{int} = E_p - E_a,$$

que es negativa. Un hecho muy importante a tener en cuenta es que la energía de intercambio tiene naturaleza electrostática, y no se apoya en corrientes eléctricas o dipolos magnético, lo cual coincide con el hecho de que las interacciones dipolares (ver I..12) presentan energías mucho menores de las observadas en materiales como el hierro.

De otro lado las configuraciones con espines paralelos suelen implicar energías cinéticas mucho mayores que  $|E_{int}|$ , por tal motivo las disposiciones de electrones con espines paralelos se ven desfavorecidas. Sin embargo hay excepciones a lo anterior, en particular en algunos cristales de hierro, donde una gran cantidad de electrones con espines alineados permiten compensar la energía cinética con la energía de intercambio. En esta instancia es pertinente definir un Hamiltoniano efectivo para un sistema con dos electrones, y dado que la energía de intercambio es de naturaleza eléctrica, y se define en función de la orientación de los espines, entonces

$$\hat{H}^{ef} = -2J\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2, \quad (\text{I..13})$$

donde  $\hbar\hat{S}_1$  y  $\hbar\hat{S}_2$  son los operadores de espín de los electrones y  $J$  es una constante (energía). Un planteamiento más formal basado en operadores de intercambio de electrones se puede encontrar en [17] p.39-40. Por construcción, el operador  $\hat{S}_1 + \hat{S}_2$  tiene autofunciones con espín total  $s \in \{0, 1\}$ , de hecho existen tres autofunciones  $\chi_T$  (*triplet*) para el caso  $s = 1$  y sólo uno  $\chi_S$  (*singlet*) para el caso  $s = 0$ , notándose que los primeros son simétricos respecto al intercambio de electrones mientras que el singlet es antisimétrico. Respecto al operador  $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$  el autovalor para los estados triplet es  $\frac{1}{4}$  y el correspondiente para el singlet es  $-\frac{3}{4}$ .

Los espines también influyen en la forma de la función de onda del par de electrones, debido a que en ausencia de campos magnéticos externos y situaciones no relativísticas, la

mencionada función es del tipo

$$\Psi(1, 2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(s_1, s_2),$$

donde  $\psi$  representa la distribución espacial de los electrones y  $\chi$  la función de los espines. La función  $\Psi$  tiene dos características

$$|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2, \text{ debido a que los electrones son indistinguibles, y}$$

$$\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1), \text{ porque los electrones son fermiones.}$$

Dado que los autovectores del triplet son simétricos, la componente espacial de  $\Psi$  debe ser antisimétrica, y como el singlet es antisimétrico la parte espacial debe ser simétrica, por lo tanto si  $\psi$  se descompone en funciones para cada electrón

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1))\chi_S,$$

$$\Psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1))\chi_T,$$

donde  $\chi_S$  es el autovector singlet,  $\chi_T$  es un elemento del triplet,  $\psi_a$  y  $\psi_b$  son funciones espaciales.

El siguiente propósito es hallar una expresión para la energía de intercambio  $J$ , y en base a que ésta provenía de energías electrostáticas, se plantea lo siguiente: En I..13 se define el Hamiltoniano efectivo  $\hat{H}^{ef}$  como el producto de la constante  $J$  (energía de intercambio) y el término adimensional  $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$  que cuantifica la interacción de los espines, por lo tanto es necesario determinar  $J$  y para tal fin se puede considerar el Hamiltoniano  $\hat{H}$  de un sistema compuesto por dos núcleos atómicos con sus respectivos electrones  $a$  y  $b$ , con la condición de que cada electrón sólo está sometido al potencial de su respectivo núcleo. Dicho Hamiltoniano se puede descomponer de la siguiente manera

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \hat{H}_i + \frac{e^2}{r_{12}} + \hat{H}_c,$$

donde  $\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_e} + V_i$  con la aclaración que  $\nabla_i^2$  opera sobre las coordenadas del electrón  $i$  y de igual manera la energía potencial  $V_i$ ;  $r_{12}$  es la distancia entre los electrones y  $\hat{H}_c$  es el Hamiltoniano que opera sobre los núcleos. En base a lo expuesto se pueden calcular la energías de  $\Psi_S$  y  $\Psi_T$ :

$$E_a = \int \Psi_S^* \hat{H} \Psi_S d\tau_1 d\tau_2,$$

$$E_p = \int \Psi_T^* \hat{H} \Psi_T d\tau_1 d\tau_2,$$

donde el símbolo integral representa la integración sobre el espacio y suma sobre los espines. En particular

$$E_a = \sum_1^2 \int \Psi_S^* H_i \Psi_S d\tau_1 d\tau_2 + \int \Psi_S^* \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_S d\tau_1 d\tau_2 + \int \Psi_S^* H_c \Psi_S d\tau_1 d\tau_2. \quad (\text{I..14})$$

El último término en la ecuación anterior sólo involucra a los núcleos, que se pueden considerar alejados entre sí, por lo que no es de interés su estudio. Por otro lado para la primera

expresión, denotada como  $E_e = E_1 + E_2$  a partir de las definiciones

$$\begin{aligned}
E_1 &= \int \Psi_S^* H_1 \Psi_S d\tau_1 d\tau_2 \\
&= \frac{1}{2} \int (\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1))^* H_1 (\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)) dr_1 dr_2 \\
&= \frac{1}{2} \int |\psi_b(r_2)|^2 \psi_a^*(r_1) H_1 \psi_a(r_1) dr_1 dr_2 + \frac{1}{2} \int |\psi_b(r_1)|^2 \psi_a^*(r_2) H_1 \psi_a(r_2) dr_1 dr_2 \\
&= \int \psi_a^*(r_1) H_1 \psi_a(r_1) dr_1,
\end{aligned}$$

y  $E_2 = \int \Psi_S^* H_2 \Psi_S d\tau_1 d\tau_2 = \int \psi_b^*(r_1) H_2 \psi_b(r_1) dr_1$ , se obtiene

$$E_e = \int \psi_a^*(r_1) H_1 \psi_a(r_1) dr_1 + \int \psi_b^*(r_1) H_2 \psi_b(r_1) dr_1,$$

siendo ésta la energía del par de electrones cuando están alejados entre sí y no interactúan.

El término intermedio en la ecuación I.14, denominada  $E_{12}$ , es igual a

$$\begin{aligned}
&\int \frac{e^2}{2r_{12}} |\psi_a(r_1)|^2 |\psi_b(r_2)|^2 dr_1 dr_2 + \int \frac{e^2}{2r_{12}} |\psi_a(r_2)|^2 |\psi_b(r_1)|^2 dr_1 dr_2 \\
&+ \int \frac{e^2}{2r_{12}} \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) dr_1 dr_2 \\
&+ \int \frac{e^2}{2r_{12}} \psi_a^*(r_2) \psi_b^*(r_1) \psi_b(r_2) \psi_a(r_1) dr_1 dr_2,
\end{aligned}$$

donde es evidente que los sumandos de la primera línea representan la interacción de Coulomb, mientras que la suma de los términos en las líneas segunda y tercera es la energía de intercambio, definida líneas arriba, y cuyo origen se remonta al principio de exclusión de Pauli.

De forma análoga se calcula la energía de un estado del triplet, obteniéndose un  $E_e$  igual al caso anterior, mas la energía  $E_{12}$  es diferente:

$$\int \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_a(r_1)|^2 |\psi_b(r_2)|^2 dr_1 dr_2 - \int \frac{e^2}{r_{12}} \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) dr_1 dr_2,$$

por lo tanto se llega a la expresión

$$E_p - E_a = -2 \int \frac{e^2}{r_{12}} \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) dr_1 dr_2,$$

y se obtiene

$$J = \int \frac{e^2}{r_{12}} \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) dr_1 dr_2.$$

De la ecuación anterior se contempla que si  $J > 0$  entonces  $E_a > E_p$  y los estados del triplet son favorecidos, por el contrario si  $J < 0$  se tiene que  $E_a < E_p$  y el estado singlet tiene preponderancia. Lo anterior se puede extender para redes cristalinas con muchos átomos, en cuyo caso el Hamiltoniano apropiado es del tipo

$$\hat{H} = -2 \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j,$$

donde la suma es sobre todos los espines.

Para muchos materiales de interés el momento angular orbital  $\hat{L}$  está atenuado, por ejemplo en los iones metálicos  $3d$  (Fe, Co, Ni, etc), motivo por el cual su contribución en el Hamiltoniano I.11 es despreciable, quedando el operador  $\hat{S}$  como el único relevante, por ello si existe un campo magnético externo, se asocia a los cuerpos ferromagnéticos el Hamiltoniano

$$\hat{H} = -2 \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + g\mu_B \sum_j \hat{S}_j \cdot \vec{B}, \quad (\text{I.15})$$

donde la primera suma (energía de intercambio) es sobre todos los espines y  $J_{ij}$  es la constante de intercambio, y el segundo término es la energía de Zeeman.

## 2. Modelos macroscópicos.

Debido a que el origen del ferromagnetismo ha sido descrito previamente es momento de presentar algunos modelos que tratan de explicar el comportamiento macroscópico de los ferromagnetos.

**Modelo de Weiss.** También conocido como el modelo de campo medio, debido a que se define un campo molecular efectivo sobre la posición  $i$  :

$$\vec{B}_{mf} = -\frac{2}{g\mu_B} \sum_j J_{ij} \hat{S}_j,$$

donde la suma es sobre todos los espines. Esta expresión se puede introducir en la ecuación I.15

$$\hat{H} = g\mu_B \sum_j \hat{S}_j \cdot (\vec{B} + \vec{B}_{mf}),$$

donde el Hamiltoniano se asemeja al de un material paramagnético dentro de un campo  $\vec{B} + \vec{B}_{mf}$  (ver ecuación I.11), y se debe resaltar que una admisión subyacente es que todos los espines están sometidos al mismo campo molecular.

Puesto que  $\vec{B}_{mf}$  mide el ordenamiento de los espines, se puede asumir que la magnetización  $\vec{M}$  cumple

$$\vec{B}_{mf} = \lambda \vec{M},$$

con  $\lambda$  una constante positiva. Como se sugirió líneas arriba, una forma de trabajar este modelo es considerar que se tiene un material paramagnético sometido a un campo  $\vec{B} + \vec{B}_{mf}$  (ver [5]), enfoque que exhibe una magnetización espontánea para temperaturas menores a una cierta temperatura crítica  $T_C$  como se evidencia en la imagen

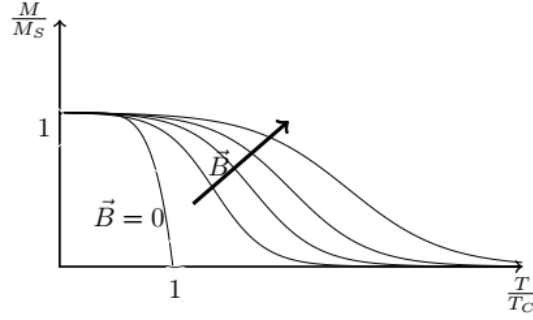


Figura II: Comportamiento de la magnetización para diversos valores del campo  $\vec{B}$ , donde la flecha indica que el módulo del campo se incrementa (ver [5]p.90).

En la gráfica previa  $M_s$  es la magnetización de saturación, es decir la magnetización máxima que puede alcanzar el material. Adicionalmente la susceptibilidad magnética  $\chi$  muestra un comportamiento divergente en las inmediaciones de  $T_C$

$$\chi \sim (T - T_C)^{-1}.$$

**Modelo de Landau :** En este caso cada espín está sometido a un campo producido por los demás espines, y este es proporcional a la magnetización, y por definición ignora las fluctuaciones y correlaciones entre los espines. La energía libre se expresa como

$$F(M) = F_0 + a(T)M^2 + bM^4,$$

donde  $F_0$  es una constante,  $a()$  una función,  $b$  una constante positiva y  $M$  el módulo de la magnetización. La función  $a$  es positiva para temperaturas mayores a un cierto valor  $T_C$ , llamada temperatura crítica, y negativa para temperaturas menores, además cerca a  $T_C$  es casi lineal,  $a(T) = a_0(T - T_C)$  con  $a_0 > 0$ , de manera tal que el estado base ( $\frac{\partial F}{\partial M} = 0$ ) debe verificar

$$M = 0 \text{ o } M = \pm \left( \frac{a_0(T_C - T)}{2b} \right)^{\frac{1}{2}},$$

donde la segunda expresión sólo tiene sentido para  $T < T_C$ . Por otro lado el primer término tiene un punto de equilibrio inestable para temperaturas menores a  $T_C$ , por consiguiente se obtiene

$$M = \begin{cases} \pm \left( \frac{a_0(T_C - T)}{2b} \right)^{\frac{1}{2}} & \text{si } T < T_C, \\ 0 & \text{si } T \geq T_C, \end{cases}$$

que concuerda con la figura II.

Luego de haber estudiado la naturaleza cuántica del ferromagnetismo y dos modelos que lo describen, es adecuado poner en evidencia el comportamiento experimental de los ferromagnetos. Esta demostrado experimentalmente que estos materiales, incluso para  $T < T_C$ , presentan *dominios de magnetización*, es decir existen regiones en su interior donde los espines tienen igual orientación y producen una cierta magnetización. Estas regiones tienen magnetizaciones con diversas magnitudes y direcciones como se aprecia en la imagen

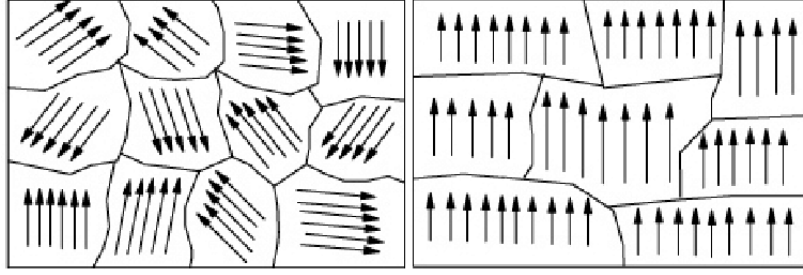


Figura III: En la izquierda los dominios tienen diversas direcciones y en la derecha están alineados.

Por añadidura un material a temperatura  $T < T_C$  suele tener varias configuraciones posibles de dominios cuando el campo  $B$  es nulo, motivo por el cual la magnetización total, que sería la media de las magnetizaciones de todos los dominios, puede tomar distintos valores entre  $-M(T)$  y  $M(T)$  en distintos experimentos, con  $M(T)$  la magnetización teórica a la temperatura  $T$ . Por lo expuesto la mayor parte de los modelos y resultados mostrados asumen que se está trabajando dentro de alguno de los dominios, y en la práctica la magnitud  $M(T)$  para  $B = 0$  (magnetización espontánea) se obtiene midiéndola para  $B > 0$  cada vez más pequeña y extrapolando los resultados.

### C. Transición de fase.

Los objetos materiales se pueden encontrar en diversos estados de agregación o de fase, con una estructura interna y propiedades características. Las condiciones externas, como la presión, la temperatura, el campo magnético, entre otros, determinan en qué fase se encuentra una determinada porción de materia, motivo por el cual si se modifican los factores externos se puede producir un cambio o *transición de fase*. Las transiciones de fase son fenómenos emergentes, es decir no se pueden explicar a partir del comportamiento individual de sus componentes (como átomos y moléculas), sino que se debe considerar la interacción entre ellos y por lo tanto un punto de vista macroscópico es necesario.

El ejemplo más tangible de una transición de fase ocurre cuando una cantidad de agua congelada (estructura cristalina) se funde por el aumento de la temperatura y se transforma en agua líquida, y si la temperatura aumenta aun más se convierte en gas. Este proceso es gradual y bajo ciertas condiciones pueden coexistir dos o incluso las tres fases. Esto se aprecia en el siguiente diagrama de fases.

Como se muestra en dicho gráfico se puede pasar del estado líquido al gaseoso de muchas formas, cruzando la frontera  $AC$  (flecha verde), a través del punto  $E$  (flecha amarilla) o rodeando el punto  $E$  (flecha azul). En el primer caso se dice que la transición es *discontinua*, es decir la derivada parcial de la energía libre de Helmholtz,  $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ , es discontinua y además el calor latente es no nulo, lo cual significa que una cantidad de calor es absorbida. En el segundo caso se tiene una transición *continua*, donde las derivadas de  $F$  son continuas, y ambos estados llegan a ser indistinguibles entre sí al punto de tener igual densidad, mas observables como la compresibilidad divergen al acercarse al punto  $E$ . En el último caso ningún observable físico presenta alguna discontinuidad. El punto  $E$  es conocido como el **punto crítico**, y se define como aquel punto  $(T_C, P_C)$  del diagrama de fases donde las densidades del estado gaseoso y líquido llegan a ser iguales, o aquel punto donde la entropía es discontinua pero para temperaturas ligeramente mayores es continua.

Es un hecho notorio que para las transiciones sólido-gas y sólido-líquido no existe un punto crítico, por lo tanto dichos cambios son siempre discontinuos. Esto se puede explicar

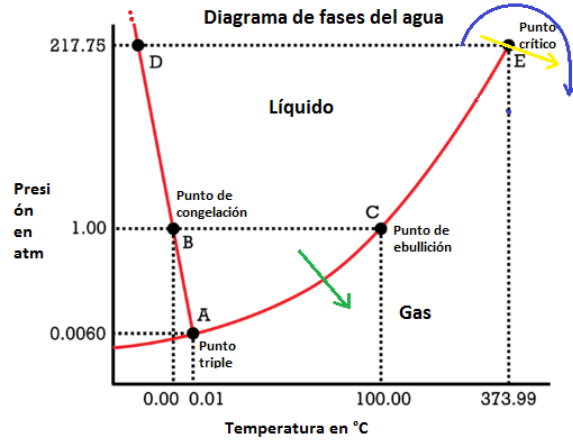


Figura IV: Diagrama de fases del agua.

porque la total simetría rotacional y traslacional de la fase líquida se mantiene en la fase gaseosa. Por otro lado la transformación de líquido a sólido o de gas a sólido implica que algunas simetrías de la primera fase se pierden al pasar a la segunda. Este argumento se desarrollará en la subsección siguiente.

Otro caso conocido de transición de fase es el de los materiales ferromagnéticos, que dependiendo de su temperatura y presión, presentan una magnetización  $\vec{M} = 0$  o  $\vec{M} \neq 0$ , en ausencia de campos externos. El siguiente diagrama de fases corresponde al hierro, donde la región inferior muestra un comportamiento ferromagnético y una estructura cristalina bcc.

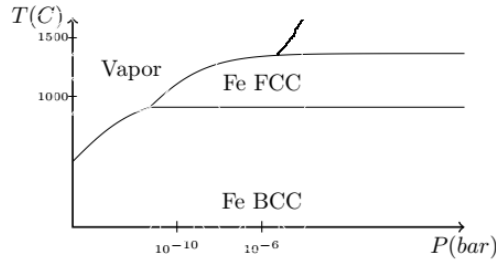


Figura V: Diagrama de fases del hierro.

Para una presión dada, existe una temperatura crítica  $T_c$  de manera que para temperaturas superiores los espines electrónicos están orientados en todas direcciones, por lo tanto existe una total simetría rotacional, mas para temperaturas inferiores a  $T_c$  el sistema elige una dirección y por lo tanto posee una reducida simetría rotacional. En la siguiente gráfica se muestra cómo para temperaturas menores a  $T_c$  la magnetización asume una dirección o la contraria, dependiendo de la alineación de los espines.

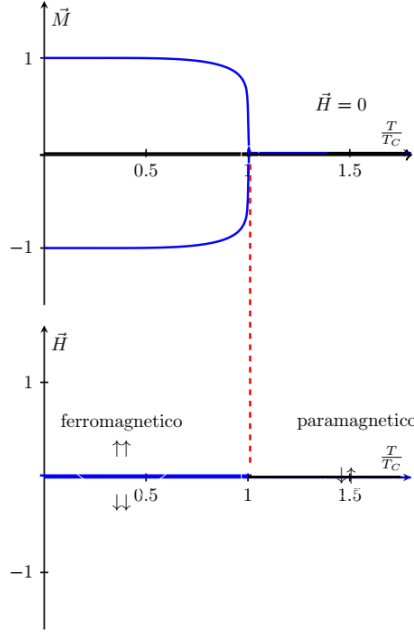


Figura VI: Comportamiento de la magnetización de un ferromagneto.

Como se resaltó líneas arriba, las transiciones de fase requieren un estudio macroscópico para su comprensión, por lo cual es de utilidad contar con un observable termodinámico denominado **parámetro de orden**. En el caso de la transición gas-líquido este parámetro es la diferencia  $\rho_L - \rho_C$  o  $\rho_G - \rho_L$ , donde  $\rho_G, \rho_L, \rho_C$  son las densidades de la fase gaseosa, líquida y en el punto crítico, respectivamente. Por otro lado, en la transición paramagnético-ferromagnético dicho parámetro es la magnetización  $\vec{M}$ . Para otros tipos de transiciones se pueden encontrar apropiados parámetros de orden y temperaturas críticas  $T_C$ , cuyo comportamiento depende de si la transformación es continua o discontinua, así en el primer caso el parámetro aumenta continuamente desde cero, mientras en el segundo caso presenta una discontinuidad finita en  $T_C$ .

Existe una clasificación de transiciones de fase propuesta por Ehrenfest que determina que una transición de fase es de *primer orden* si algún potencial termodinámico (como la energía libre  $G = G(T, N, V)$ ) tiene al menos una derivada parcial discontinua. Extendiendo lo anterior, para  $n \geq 1$ , se dice que una transición de fase es de *orden n* si todas las derivadas parciales de órdenes menores a  $n$  son continuas pero al menos una de las derivadas parciales de orden  $n$  es discontinua. Si  $\alpha$  y  $\beta$  denotan las fases en equilibrio, lo anterior se denota explícitamente como sigue

$$\left(\frac{\partial^m G_\alpha}{\partial T^m}\right)_P = \left(\frac{\partial^m G_\beta}{\partial T^m}\right)_P \text{ y } \left(\frac{\partial^m G_\alpha}{\partial P^m}\right)_T = \left(\frac{\partial^m G_\beta}{\partial P^m}\right)_T \quad \forall m \leq n-1,$$

$$\left(\frac{\partial^n G_\alpha}{\partial T^n}\right)_P \neq \left(\frac{\partial^n G_\beta}{\partial T^n}\right)_P \text{ o } \left(\frac{\partial^n G_\alpha}{\partial P^n}\right)_T \neq \left(\frac{\partial^n G_\beta}{\partial P^n}\right)_T,$$

donde  $G$  es la energía libre de Gibbs,  $T$  la temperatura y  $P$  la presión. En la práctica sólo son importantes las transiciones de primer y segundo orden, cuyas principales características son

Primer orden:

- $G(T, P)$  es continua,

- $S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P$  y  $V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T$  son discontinuos,
- Existe un calor latente, esto es una cantidad de energía necesaria para ciertas transiciones donde la temperatura o presión se mantienen constantes.

Segundo orden:

- $G(T,P)$  es continua,
- $S(T,P)$  y  $V(T,P)$  son continuas,
- Magnitudes como la compresibilidad isotérmica  $\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}\right)_T$  son discontinuas.

Siguiendo este criterio, un ejemplo muy conocido de transición de primer orden sería el paso de agua líquida a vapor de agua cruzando la línea de coexistencia  $AC$  mostrado en la figura IV, en el cual el volumen y la densidad presentan una discontinuidad al pasar de un estado a otro. De otro lado la transición a través del punto crítico sería un ejemplo de una transición de segundo orden, así como cuando ciertos materiales se vuelven superconductores en ausencia de campos magnéticos externos.

Si bien el esquema de Ehrenfest abarca muchos casos de transiciones de fase, presenta inconvenientes cuando se intenta clasificar fenómenos donde las partículas tienen largas longitudes de correlación, es decir cuando partículas muy distantes influyen entre sí, como en el caso de los materiales ferromagnéticos. En la actualidad se da mayor preponderancia al parámetro de orden en dicha clasificación, pero el criterio de Ehrenfest aun tiene cierta influencia, así una transición de **primer orden** sigue verificando las condiciones de Ehrenfest y es lo mismo que una transición discontinua, mientras que una de **segundo orden** presenta un parámetro de orden continuo, la correlación entre las partículas es de amplio rango y parámetros como el calor específico y la susceptibilidad magnética divergen cerca al punto crítico. Las transiciones gas-líquido, gas-sólido y líquido-sólido son muestras del primer tipo. La transición ferromagnético-paramagnético pertenece al segundo tipo debido a la divergencia de magnitudes como el calor específico y la susceptibilidad magnética, también se incluyen en este grupo las transiciones antiferromagnético-paramagnético, de superfluidos y cristales líquidos.

## 1. Exponentes críticos.

Al inicio de la presente sección se comparte el diagrama de fases del agua, con los tres estados separados por fronteras donde ocurren las transiciones de fase, en particular la frontera líquido-gas finaliza en el punto crítico  $E$ . Estas características también se observan en los diagramas de fases de muchos otros materiales, en particular se muestra el diagrama de fases del xenón

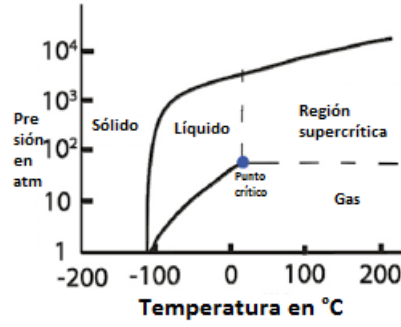


Figura VII: Diagrama de fases de Xenón, compare con Figura IV.

Estas cualidades, en especial la existencia de una temperatura crítica se extienden a muchos otros gases como el argón, kriptón, neón, nitrógeno, oxígeno, monóxido de carbono, etc. Aún más sorprendentemente es que sistemas físicos muy distintos a los anteriores, como los sólidos ferromagnéticos, también presentan puntos críticos que delimitan curvas de coexistencia de estados, como se muestra en las figuras IV y VI(imagen inferior).

Las similitudes no son sólo cualitativas, por el contrario se ha observado por ejemplo que para muchos materiales, la densidad a temperaturas justo por debajo de  $T_C$  se comporta como

$$\rho(T) - \rho_C = \pm |T - T_C|^\beta,$$

donde  $\rho_C$  es la densidad crítica,  $\beta \sim \frac{1}{3}$ , + corresponde a la fase líquida y - a la gaseosa. En los objetos ferromagnéticos ocurre algo análogo, para temperaturas inferiores pero muy cercanas a  $T_C$  donde el módulo de la magnetización se comporta como

$$M(T) \sim |T - T_C|^\beta,$$

con  $\beta \sim \frac{1}{3}$ , además se resalta el hecho de que  $\rho(\cdot) - \rho_C$  y  $M(\cdot)$  son los parámetros de orden de sus respectivos sistemas. Esta asombrosa conexión entre los comportamientos de ciertos gases y los materiales ferromagnéticos se replica cuando se estudia la compresibilidad de ciertos fluidos, donde

$$\kappa \sim |T - T_C|^{-\gamma}$$

y la susceptibilidad magnética de los materiales ferromagnéticos uniaxiales

$$\chi \sim |T - T_C|^{-\gamma},$$

en ambos casos con  $\gamma \sim 1.24$ . Es entonces razonable considerar un tipo de *universalidad*, es decir una propiedad o comportamiento común para un amplio espectro de fenómenos, lo cual implica el estudio de los célebres *exponentes críticos* (como  $\beta$  y  $\gamma$ ). Una definición formal, con  $t = T - T_C$  se ofrece a continuación:

**Definición C..1.** Sea  $f$  un observable que diverge cerca a  $T_c$ , entonces se define su *exponente crítico* asociado como

$$\frac{d \log f}{d \log t}(t).$$

A continuación se muestran algunos exponentes críticos:

Tabla I: Observables y sus exponentes críticos.

| Exponente crítico | Observable         | Comportamiento crítico |
|-------------------|--------------------|------------------------|
| $\alpha$          | Calor específico   | $\sim  t ^{-\alpha}$   |
| $\gamma$          | Susceptibilidad    | $\sim  t ^{-\gamma}$   |
| $\beta$           | Parámetro de orden | $\sim  t ^\beta$       |

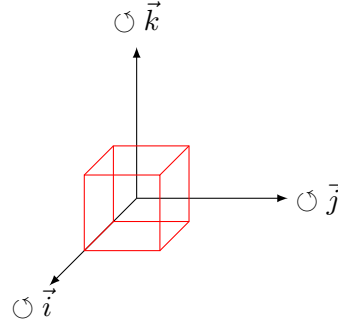
Diversos modelos ofrecen aproximaciones de los exponentes críticos experimentales, en la siguiente tabla se muestran algunos de ellos.

Tabla II: Algunos modelos y los valores de sus exponentes críticos, [14] p.14

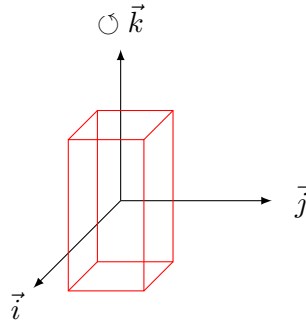
| Modelo        | $\alpha$ | $\beta$       | $\gamma$      |
|---------------|----------|---------------|---------------|
| 2D Ising      | 0        | $\frac{1}{8}$ | $\frac{7}{4}$ |
| 3D Ising      | 0.11     | 0.32          | 1.24          |
| 3D XY         | -0.01    | 0.35          | 1.32          |
| 3D Heisenberg | -0.12    | 0.36          | 1.39          |

## D. Ruptura espontánea de simetría.

La idea intuitiva de simetría involucra una invarianza de un sistema físico respecto a una transformación, como por ejemplo una reflexión, rotación o traslación. Para ilustrar esta noción se considera un sólido cristalino con estructura cúbica simple, con longitudes de la celda unitaria  $l_1 = l_2 = l_3$  y simetrías rotacionales en los tres ejes, tal como se muestra en la siguiente figura



El mismo sólido pero a una temperatura inferior presenta una estructura cristalina distinta, una tetragonal, es decir  $l_1 = l_2 \neq l_3$ . En esta situación ya no posee las simetrías rotacionales de  $\frac{\pi}{2}$  en los ejes  $X$  e  $Y$



En ambos casos las configuraciones o estados de los cristales tienen un grupo de simetrías.

El tratamiento formal de lo anterior, desde una perspectiva cuántica, involucra un espacio de Hilbert donde habitan los estados o configuraciones  $\psi$  del sistema físico, así como operadores unitarios  $\hat{U}$  que actúan sobre dicho espacio y representan las simetrías.

**Definición D..1.** *Un estado  $\psi$  es simétrico respecto a una transformación unitaria  $\hat{U}$  si el estado transformado es idéntico al inicial, salvo un factor de fase:*

$$\hat{U}\psi = \exp(i\theta)\psi.$$

Las transformaciones también actúan sobre las ecuaciones de movimiento, o equivalentemente sobre el Lagrangiano o Hamiltoniano, por lo tanto se define.

**Definición D..2.** *El Hamiltoniano  $\hat{H}$  es simétrico respecto a una transformación unitaria  $\hat{U}$  si*

$$\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \hat{H} \text{ o equivalentemente } [\hat{U}, \hat{H}] = 0,$$

donde  $\hat{U}^\dagger$  es la adjunta de  $\hat{U}$ . Lo anterior también se expresa asegurando que  $\hat{U}$  es una simetría de  $\hat{H}$ .

De lo previo se deduce que para cualquier estado  $\psi$ , simétrico o no,

$$\int (\hat{U}\psi)^* \hat{H} (\hat{U}\psi) \, dx = \int \psi^* \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} \psi \, dx = \int \psi^* \hat{H} \psi \, dx,$$

es decir la esperanza del operador  $\hat{H}$  en cualquier estado es invariante bajo  $\hat{U}$ .

Ahora que se cuenta con las dos definiciones previas es posible dar la siguiente definición:

**Definición D..3.** *Una ruptura espontánea de simetría (RES) ocurre cuando un estado estable de un sistema (como un estado base o un estado de equilibrio térmico) no posee una simetría del Lagrangiano o Hamiltoniano del sistema.*

Desde la perspectiva de la teoría de campos la noción de simetría de un Lagrangiano o Hamiltoniano es similar al caso anterior, por ejemplo

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \phi^* \partial^\mu \phi - m^2 \phi^* \phi,$$

con  $\partial_\mu = (\frac{\partial}{\partial t}, \nabla)$ ,  $\partial^\mu = (\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla)$ ,  $m$  constante, tiene simetría  $U(1)$ , es decir es invariante bajo las rotaciones:

$$\phi(x) \rightarrow \exp(i\theta)\phi(x),$$

con  $\theta$  independiente del espacio-tiempo.

Además la definición previa de una RES es general, en el sentido de que también tiene sentido en la mecánica clásica y la teoría de campos. En esta última, el siguiente Lagrangiano ilustra una ruptura de simetría

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_u \phi)^2 - \frac{m^2}{2}\phi^2 - \frac{\lambda}{4}\phi^4, \quad (\text{I..16})$$

con  $(\partial_u \phi)^2 = (\frac{\partial \phi}{\partial t})^2 + \Delta \phi$ ,  $m$  y  $\lambda$  constantes, que es invariante bajo la transformación

$$\phi \rightarrow -\phi.$$

La funcional de energía respectiva es

$$E = \int \left( \frac{1}{2} (\partial_u \phi)^2 + \frac{m^2}{2} \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4 \right) dx,$$

de lo cual se deduce que la energía mínima se obtiene si  $\phi$  es independiente del tiempo y el espacio, en otras palabras una configuración de campo con la menor energía debe ser constante. En seguida se examina el potencial

$$V(\phi) = \frac{m^2}{2} \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4,$$

y se procede a inspeccionar la constante  $m^2$  :

- En caso  $m^2 \geq 0$  el mínimo de  $V$  ocurre cuando  $\phi = 0$ , que es invariante bajo la transformación cambio de signo. Si se perturba dicho estado, su Lagrangiano es igual a I.16.
- Si  $m^2 < 0$  entonces  $V$  tiene un máximo en  $\phi = 0$ , y los mínimos se obtienen en los estados  $\phi = \pm \phi_0 = \pm \sqrt{\frac{-m^2}{\lambda}}$ .

En el segundo caso los estados  $\pm \phi_0$  no son invariantes respecto a la transformación  $\phi \rightarrow -\phi$ , por lo que se dice que la simetría se ha roto. Como colofón la energía de dichos estados es  $-\Omega \frac{m^4}{4\lambda}$ , donde  $\Omega$  es el volumen del espacio.

A continuación se muestran ejemplos de *RES* en diferentes contextos.

## 1. Ejemplo desde la mecánica clásica.

El sistema físico elegido se compone de un anillo delgado de radio  $R$  suspendido verticalmente por una cuerda, además gira sin fricción con una velocidad angular  $\omega$ . También se tiene una pequeña cuenta con masa  $m$  ensartada en el anillo, que puede deslizarse sin fricción, como se muestra en la siguiente figura.

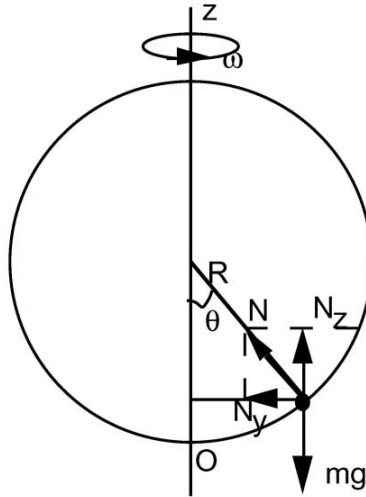


Figura VIII: Sistema anillo-cuenta.

La cuenta se encuentra en equilibrio cuando las fuerzas que actúan sobre ella se compensan, es decir

$$\begin{aligned} N_Z - mg &= N \cos \theta - mg = 0, \\ N_Y - ma &= (N - m\omega^2 R) \sin \theta = 0, \end{aligned}$$

donde  $N_Y, N_Z$  son las componentes de la fuerza normal sobre la cuenta,  $g$  la aceleración de la gravedad,  $a$  la aceleración centrífuga y  $\theta$  el ángulo con el eje  $Z$ . Combinando ambas ecuaciones se obtiene

$$m \sin \theta (1 - \beta \cos \theta) = 0, \quad (\text{I.17})$$

con  $\beta = \frac{\omega^2 R}{g}$ , cuyas soluciones son las siguientes:

1.  $\theta = 0$ ,
2.  $\theta = \pm \theta_1 \neq 0$  tal que  $\cos \theta_1 = \frac{1}{\beta}$ .

A partir del análisis de dichas soluciones se concluye que existe una velocidad angular crítica  $\omega_C$ , de manera que si  $\omega \leq \omega_C$  entonces  $\theta = 0$  es la solución del sistema en equilibrio, o si  $\omega > \omega_C$  entonces  $\theta = \pm \theta_1$  son las posibles soluciones.

Un estudio alterno del problema anterior se basa en el Lagrangiano del sistema,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m R^2 \dot{\theta}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 R^2 \sin^2 \theta - mgR(1 - \cos \theta),$$

en específico en la energía potencial del sistema, que es la suma de los dos últimos términos

$$V = mgR \left( 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} (1 - \beta \cos^2 \frac{\theta}{2}) \right).$$

La cuenta estará en equilibrio si  $V$  tiene un mínimo, es decir  $\frac{\partial V}{\partial \theta} = 0$ , lo cual implica nuevamente la ecuación I.17, mas este planteamiento tiene dos ventajas adicionales, siendo la primera referente a la estabilidad de las soluciones: Si  $\frac{\partial^2 V}{\partial \theta^2} = \cos \theta - \beta \cos^3 \theta > 0$  entonces las soluciones son estables, por lo tanto

- Para  $\theta = 0$  la cuenta es estable si  $\beta < 1$ ,
- En caso  $\theta = \pm \theta_1$  la cuenta es estable si  $\beta > 1$ .

Lo anterior se puede resumir asegurando que  $\beta_C = 1$  u  $\omega_1 = \sqrt{\frac{g}{R}}$  es un valor crítico donde la solución de equilibrio estable  $\theta = 0$  cambia a  $\theta = \pm \theta_1$ , siendo estas no simétricas bajo reflexión. Una segunda ventaja es que permite observar cómo varía el comportamiento de  $V$ , que es simétrica bajo reflexión, tal como se aprecia en la siguiente gráfica.

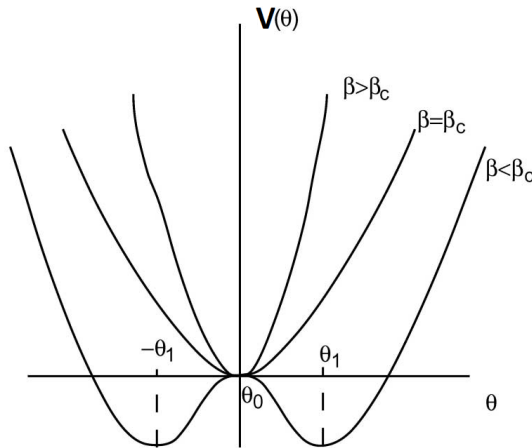


Figura IX: Energía potencial  $V$ .

Se debe recalcar que el adjetivo espontáneo en una *RES* se refiere a que una perturbación o anisotropía, por mínima que sea, puede hacer que el sistema se decante por uno de dichos estados.

## 2. Ejemplo desde la Teoría de campos.

En los materiales ferromagnéticos la energía de intercambio decrece exponencialmente con la distancia, es por ello que en materiales como el  $CsNiF_3$ , donde las distancias longitudinales entre moléculas son notablemente menores a las transversales, las energías de intercambio longitudinales son al menos  $10^3$  veces las respectivas transversales. Por lo tanto dichos materiales se pueden considerar como cadenas de espines o arreglos unidimensionales, donde las partículas se colocan sobre el eje  $Z$ , además se introduce un campo magnético externo  $\vec{B}$  con dirección paralela al eje  $X$ , por lo cual su Hamiltoniano es

$$\hat{H} = -J \sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1} + A \sum_i (\hat{S}_i^z)^2 - \gamma B \sum_i \hat{S}_i^x, \quad (I..18)$$

donde

- El primer sumando proviene de la interacción de espines adyacentes, con  $J > 0$  la constante de intercambio y  $\hat{S}_i$  es el operador de espín de la  $i$ -ésima partícula,
- El segundo término representa la influencia de la anisotropía del material y  $A > 0$  es una constante,
- El último sumando cuantifica la interacción de los espines y el campo magnético externo, además  $\gamma > 0$  depende de la temperatura.

Los operadores espín verifica la célebre relación

$$i\hbar \frac{d\hat{S}_j}{dt} = [\hat{S}_j, \hat{H}] \quad \forall j,$$

por lo tanto a partir de I..18 y las relaciones de conmutación de las componentes de  $\hat{S}_j$ , se obtienen

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}_j^x}{dt} &= J[\hat{S}_j^y(\hat{S}_{j-1}^z + \hat{S}_{j+1}^z) - (\hat{S}_{j-1}^y + \hat{S}_{j+1}^y)\hat{S}_j^z] - A(\hat{S}_j^y\hat{S}_j^z + \hat{S}_j^z\hat{S}_j^y) \\ \frac{d\hat{S}_j^y}{dt} &= J[\hat{S}_j^z(\hat{S}_{j-1}^x + \hat{S}_{j+1}^x) - (\hat{S}_{j-1}^z + \hat{S}_{j+1}^z)\hat{S}_j^x] + A(\hat{S}_j^x\hat{S}_j^z + \hat{S}_j^z\hat{S}_j^x) + \gamma B\hat{S}_j^z \\ \frac{d\hat{S}_j^z}{dt} &= J[\hat{S}_j^x(\hat{S}_{j-1}^y + \hat{S}_{j+1}^y) - (\hat{S}_{j-1}^x + \hat{S}_{j+1}^x)\hat{S}_j^y] - \gamma B\hat{S}_j^y \quad \forall j. \end{aligned}$$

En este punto se realiza una aproximación semiclásica de las ecuaciones precedentes, mediante la relación

$$\hat{S}_j = \hbar\sqrt{s(s+1)}\vec{\sigma}_j,$$

donde  $\vec{\sigma}_j = (\sigma_j^x, \sigma_j^y, \sigma_j^z)$  es un vector unitario, verificándose que sus componentes evolucionan con el tiempo y cuyos cuadrados son las medias de los cuadrados de las respectivas componentes del operador  $\hat{S}_j$ . Usando esta idea el sistema de tres ecuaciones previo se transforma en

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_j^x}{dt} &= JK[\sigma_j^y(\sigma_{j-1}^z + \sigma_{j+1}^z) - (\sigma_{j-1}^y + \sigma_{j+1}^y)\sigma_j^z] - 2AK\sigma_j^y\sigma_j^z \\ \frac{d\sigma_j^y}{dt} &= JK[\sigma_j^z(\sigma_{j-1}^x + \sigma_{j+1}^x) - (\sigma_{j-1}^z + \sigma_{j+1}^z)\sigma_j^x] + 2AK\sigma_j^x\sigma_j^z + \gamma B\sigma_j^z \\ \frac{d\sigma_j^z}{dt} &= JK[\sigma_j^x(\sigma_{j-1}^y + \sigma_{j+1}^y) - (\sigma_{j-1}^x + \sigma_{j+1}^x)\sigma_j^y] - \gamma B\sigma_j^y, \end{aligned} \quad (I..19)$$

donde  $K = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ .

Los vectores  $\vec{\sigma}_j$  no están cuantizados, por ello sus componentes pueden asumir cualquier valor con tal que la suma de sus cuadrados sea 1, por consiguiente se pueden elegir dos variables angulares  $\theta_j$  y  $\phi_j$  que los parametricen (ver X):

$$\begin{aligned}\sigma_j^x &= \cos \theta_j \cos \phi_j \\ \sigma_j^y &= \cos \theta_j \sin \phi_j \\ \sigma_j^z &= \sin \theta_j.\end{aligned}$$

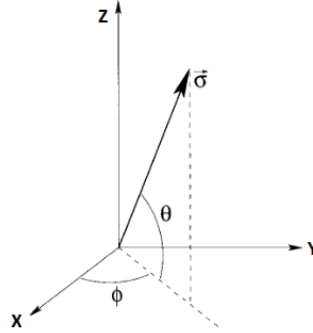


Figura X: Ángulos  $\phi$  y  $\theta$  de los espines.

Los ángulos  $\theta$  y  $\phi$  dependen de  $z$  y  $t$ , por lo tanto se puede obtener la siguiente expansión en potencias

$$\theta(z + \Delta z, t) = \theta(z, t) + \frac{\partial \theta}{\partial z}(z, t)\Delta z + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}(z, t)(\Delta z)^2 + \dots$$

Por otro lado si la  $j$ -ésima partícula está en la posición  $z$  y la  $(j \pm 1)$ -ésima ocupa la posición  $z \pm \Delta z$ , entonces gracias a la ecuación anterior se tiene

$$\theta_{j \pm 1} = \theta_j \pm \frac{\partial \theta}{\partial z}(z, t)\Delta z + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}(z, t)(\Delta z)^2 + \dots,$$

lo cual permite obtener las siguientes aproximaciones

$$\begin{aligned}\cos \theta_{j \pm 1} &\approx \cos \theta_j - \left( \pm \frac{\partial \theta}{\partial z}(z, t)\Delta z + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}(z, t)(\Delta z)^2 \right) \sin \theta_j - \frac{(\Delta z)^2}{2} \left( \frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^2 \cos \theta_j, \\ \sin \theta_{j \pm 1} &\approx \sin \theta_j + \left( \pm \frac{\partial \theta}{\partial z}(z, t)\Delta z + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}(z, t)(\Delta z)^2 \right) \cos \theta_j - \frac{(\Delta z)^2}{2} \left( \frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^2 \sin \theta_j,\end{aligned}$$

y de forma semejante para la función  $\phi$ . Reemplazando este resultado en I.19, definiendo las variables adimensionales  $\xi = z\sqrt{\frac{2A}{J(\Delta z)^2}}$  y  $\tau = t(2AK)$ , y con la constante  $b := \frac{\gamma B}{2AK}$ , se obtiene un sistema de dos ecuaciones diferenciales para los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ :

$$\begin{aligned}\phi_\tau \cos \theta &= -\theta_{\xi\xi} + (1 - \phi_\xi^2) \sin \theta \cos \theta + b \sin \theta \cos \phi \\ \theta_\tau &= \phi_{\xi\xi} \cos \theta - 2\theta_\xi \phi_\xi \sin \theta - b \sin \phi,\end{aligned}$$

donde los subíndices indican derivadas parciales. Asumiendo que la anisotropía es muy fuerte, entre otras hipótesis, el sistema de dos ecuaciones anteriores se puede simplificar para obtener la célebre ecuación de sine-Gordon:

$$\begin{aligned}\phi_{\tau\tau} - \phi_{\xi\xi} + b \sin \phi &= 0 \text{ o en notación estándar} \\ \partial_\mu \partial^\mu \phi + b \sin \phi &= 0,\end{aligned}$$

cuya solución es

$$\phi(\xi, \tau) = 4 \arctan \exp\left(\frac{\sqrt{b}(\xi - v\tau)}{\sqrt{1 - v^2}}\right),$$

donde  $v$  es una constante que se puede interpretar como un tipo de 'velocidad'. Con el objetivo de simplificar los cálculos se considera la ecuación estacionaria de sine-Gordon, es decir

$$\phi'' - b \sin \phi = 0,$$

que es equivalente a

$$\frac{1}{2}(\phi')^2 + b(\cos \phi - 1) = \frac{1}{2}(\phi')^2 - 2b \sin^2 \frac{\phi}{2} = 0$$

asumiendo las condiciones de frontera

$$\begin{aligned} \phi(-\infty) &= 0, \quad \phi(\infty) = 2\pi \\ \phi'(\pm\infty) &= 0. \end{aligned}$$

El potencial  $2b \sin^2 \frac{\phi}{2}$  en la ecuación diferencial ordinaria anterior es simétrico bajo reflexión y traslación, además presenta varios mínimos,  $\dots - 2\pi, 0, 2\pi, \dots$  que no son invariantes bajo traslación, por lo tanto hay una ruptura de simetría. Ambas afirmaciones quedan patentes en las siguientes gráficas:

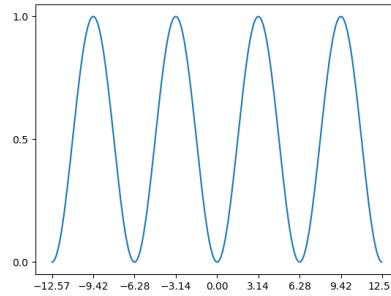


Figura XI: El Potencial.



Figura XII: Un estado  $\phi$  de energía mínima.

Además la solución de la mencionada ecuación es

$$\phi(\xi) = 4 \arctan \exp(\sqrt{b}\xi),$$

cuya gráfica se expone a continuación:

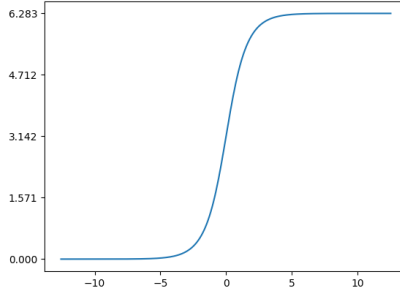


Figura XIII: Ángulo  $\phi$  en función de la posición.

En la figura precedente se aprecia cómo el ángulo  $\phi$  varía según la ubicación espacial del espín, tomando el valor 0 (en la dirección  $+X$ ) para posiciones muy a la izquierda del origen y poco a poco incrementándose hasta alcanzar el valor  $\pi$  (en la dirección  $-X$ ) en la posición 0, para finalmente aproximarse a  $2\pi$  muy lejos a la derecha. En seguida se muestra la disposición de espines:

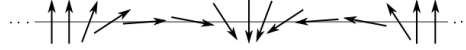


Figura XIV: Configuración de espines con  $\phi(\xi) = 4 \arctan \exp(\sqrt{b}\xi)$ .

La configuración de espines anterior es una perturbación de un estado de mínima energía, y son denominados *solitones topológicos*, adicionalmente están relacionados con las paredes de dominio, que se describieron en secciones previas.

Desde una perspectiva termodinámica el sistema busca minimizar la energía libre  $F = E - TS$ , con  $E$  la energía interna,  $T$  la temperatura y  $S$  la entropía; por ello a bajas temperaturas los estados con menor energía (ordenados) son favorecidos y por el contrario a altas temperaturas los estados con alta entropía (desordenados) tienen preeminencia. De forma paralela, las fases a baja temperatura suelen ser menos simétricas que sus contrapartes a altas temperaturas. Análogamente a la magnetización en el caso del ferromagnetismo, en general una ruptura de simetría está asociada a un *parámetro de orden* que describe el estado termodinámico del sistema, ya que es nula en la fase simétrica y diferente de cero en la fase ordenada.

Hasta el momento el número de partículas involucradas no ha tenido relevancia, es por ello que un estudio estadístico es necesario. Para ello se considera por ejemplo un sistema ferromagnético con una cantidad finita de partículas, además su Hamiltoniano tiene algunas simetrías rotacionales. Los microestados relacionados por dichas simetrías tienen igual energía, por lo tanto también igual probabilidad, y como los observables se calculan usando dichas probabilidades, estos serán invariantes bajo rotaciones. En particular la magnetización  $\vec{M}$  será simétrica respecto a la inversión de orientación de los espines, lo que conlleva a que sea nula para toda temperatura por lo cual no podría existir una ruptura de simetría. Por lo anterior se deduce que es necesario el *límite termodinámico*, esto es que el número de partículas  $N \rightarrow \infty$ , para que exista una ruptura espontánea de simetría.

Con el objetivo de sintetizar las ideas expuestas en los últimos párrafos se introduce un campo de ruptura de simetría  $\vec{h}$ , y con ello una magnetización  $\vec{M}(\vec{h}, N)$ , entonces para

determinar la magnetización espontánea (o parámetro de orden) primero se toma el límite termodinámico y luego el campo se hace tender a cero

$$\bar{M} = \lim_{|\vec{h}| \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \vec{M}(\vec{h}, N). \quad (\text{I..20})$$

En la naturaleza se observan rupturas de simetría en trozos de materia, con obviamente un número finito de partículas, pero por lo expuesto líneas arriba los modelos que se proponen predicen estas rupturas sólo en el límite termodinámico. Para conciliar estos dos hechos se proponen dos argumentos:

- La discrepancia ocurre porque siempre existe un campo magnético  $\vec{h}$ , pequeño pero no nulo. Para una temperatura  $T$ , si el número de partículas  $N$  es suficientemente grande tal que  $N \gg \frac{T}{|\vec{h}|}$  entonces la magnetización del material finito será muy cercano a la magnetización obtenida en la ecuación I..20.
- El origen del desacuerdo deriva de las escalas de tiempo, ya que la hipótesis ergódica sustenta el tratamiento estadístico de los observables. Esta hipótesis asume que durante el tiempo de observación el sistema explorará todos los microestados posibles, pero cuando hay ruptura de simetría esto falla ya que solo algunos estados son accesibles.

## II. Modelo de Ising.

En este capítulo se presenta el modelo de Ising, que es lo suficientemente simple para obtener resultados y simultaneamente captura gran parte de la física detrás del magnetismo, como la ruptura de simetría y las transiciones de fase. Además se expone de forma detallada la solución analítica propuesta por Onsager para el caso bidimensional.

### A. Introducción.

Como punto de partida se considera una rejilla conformada por un conjunto de nodos, conectados entre sí por una colección de aristas. Como muestra, en el plano se pueden tener rejillas triangulares, rectangulares, hexagonales, etc, mientras que en tres dimensiones pueden ser cúbicas, monoclinicas, entre otras.

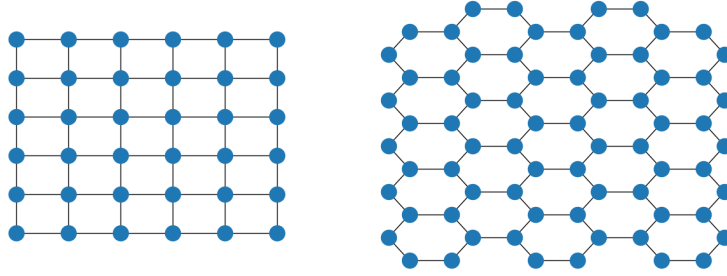


Figura XV: Rejillas cuadrada y hexagonal.

Cada nodo está conectado mediante aristas con una colección de nodos, denominados sus *vecinos inmediatos*, por ejemplo en una rejilla rectangular infinita cada nodo tiene 4 vecinos inmediatos. Si en cada nodo se ubica una partícula con un espín  $\hat{\sigma}$ , se tiene

**Definición A..1.** *El Hamiltoniano de Heisenberg de un sistema de partículas con espines, que ocupan los nodos de una rejilla cuadrada, se expresa como*

$$\hat{H} = - \sum_{i \sim j} J_{ij} \hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j - \vec{B} \cdot \sum_j \hat{\sigma}_j,$$

donde  $i \sim j$  significa que dichos nodos son vecinos inmediatos,  $J_{ij}$  depende del tipo de partículas involucradas y de las aristas,  $\vec{B}$  es un campo magnético externo y los espines  $\vec{\sigma}_i$  son operadores lineales.

Este Hamiltoniano es muy parecido al de un material ferromagnético (ecuación I..15), sólo que en el presente caso las interacciones se restringen a vecinos inmediatos. Un punto destacable es que se suele hacer una aproximación clásica del Hamiltoniano de Heisenberg, reemplazando los operadores por vectores tridimensionales, como se hizo anteriormente con los solitones.

El *modelo de Ising* hace uso de un caso particular del Hamiltoniano de Heisenberg, donde el campo  $\vec{B}$  es paralelo al eje  $Z$  y los espines sólo tienen las posibles orientaciones  $\pm 1$  en dicho eje, por lo tanto

$$H = - \sum_{i \sim j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - B \sum_j \sigma_j. \quad (\text{II..1})$$

Previo a un análisis formal, se pueden explorar las cualidades del modelo de Ising que predicen una transición de fase, esto es cuando la magnetización deja de ser nula. En particular se examina el papel de la *dimensión espacial*  $d$  que contiene a la rejilla cuadrada, y como punto de partida se elije  $d = 2$  y un campo  $\vec{B} \neq 0$ . Si un espín tiene igual orientación al campo se le denota como (+), en caso contrario como (-). A temperatura  $T = 0$  todos los espines están orientados en la dirección de  $\vec{B}$ , siendo éste el estado base con energía  $E_0$ . A temperaturas ligeramente mayores existen estados excitados, aunque con una pequeña diferencia de energía respecto a la energía base. Un estado excitado con la mínima energía  $E_1$  corresponde a un único espín invertido (-), de manera que asumiendo que la constante de intercambio  $J$  es constante, se tiene

$$E_1 - E_0 = 8J,$$

debido a que dicho espín (-) está rodeado por 4 vecinos (+), en otras palabras el espín (-) está encerrado por una pared conformada por 4 segmentos.

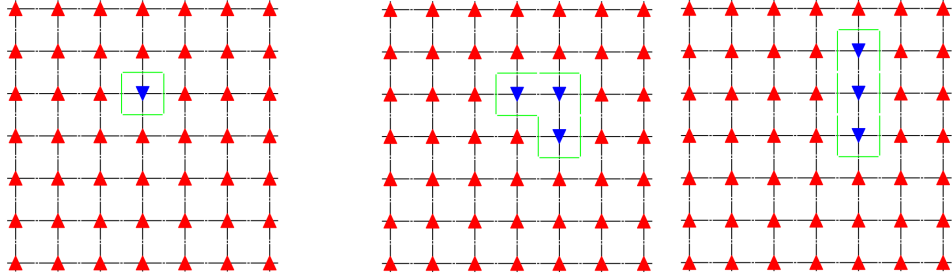


Figura XVI: Los espines (+) se muestran de color rojo, los (-) de color azul, las paredes son uniones de segmentos verdes y  $L := \#$  segmentos. En la esquina superior izquierda se muestra un dominio con un único espín (-) y  $L = 4$ . Las otras dos configuraciones muestran dominios diferentes con el mismo  $L = 8$ .

La noción de *pared* es útil, ya que delimita dominios o colectivos de espines (-) adyacentes rodeados por espines positivos, de hecho dos configuraciones diferentes con dominios rodeados por paredes de igual longitud  $L$  tienen igual energía  $E_L$  (ver Figura XVI.) Como el sistema es determinado por la energía libre  $F$ , es oportuno examinar como varía esta magnitud cuando aparece un dominio con una pared de longitud  $L$ ,

$$\Delta F(L) = \Delta E(L) - T \Delta S(L).$$

Debido a que un estado cuyo dominio tiene una pared de longitud  $L$  verifica

$$E_L - E_0 = 2LJ,$$

además el cambio en la entropía es del orden de  $L \log \alpha$ , con  $\alpha > 1$ , (ver [14] p.45) entonces

$$\Delta F(L) \sim L(2J - T \log \alpha).$$

Para temperaturas menores a  $\frac{2J}{\log \alpha}$  la formación de grandes dominios negativos es muy improbable porque el cambio de energía libre es positivo y por consiguiente las configuraciones

posibles son muy parecidas al estado base, con magnetización cercana a 1. Por otro lado para temperaturas mayores a  $\frac{2J}{\log \alpha}$  la variación de  $F$  es negativa, por ello se favorece la aparición de grandes dominios negativos que compensan a los espines positivos lo que resulta en una magnetización nula. Por lo anterior se ve que es factible una transición de fase en el modelo de Ising, al menos en estructuras espaciales bidimensionales.

## 1. El modelo de Ising $d=0$ .

En este caso el sistema consiste en un único espín  $\sigma$ , por lo tanto si  $\vec{B}$  denota al campo magnético externo, el Hamiltoniano es

$$H = -B\sigma,$$

la función de partición

$$Z = 2 \cosh(\beta B),$$

con  $\beta$  la temperatura inversa, por lo tanto el módulo de la magnetización y la susceptibilidad magnética son

$$\begin{aligned} M &= \tanh \beta B, \\ \chi &= \beta \operatorname{sech}^2 \beta B. \end{aligned}$$

De lo anterior se obtiene que cuando  $B = 0$ , la magnetización es nula independientemente de la temperatura, además la susceptibilidad es continua respecto a la temperatura. Un hecho resaltante es que si se tuvieran varios espines en una red de cualquier dimensión  $d \geq 1$ , pero donde la constante de interacción entre ellos fuera nula,  $J = 0$ , entonces la energía libre  $F$  por nodo sería la misma que en el caso de una sola partícula.

## 2. El modelo de Ising unidimensional ( $d=1$ ).

Considérese un arreglo de  $N$  partículas colocadas sobre una recta, la primera está conectada a la segunda, la segunda a la tercera, ... y la última a la primera, por ello se tienen  $N$  aristas. Cada partícula tiene espín 1 o -1, por lo tanto si  $J > 0$ , la menor energía posible es  $-2JN$  y corresponde a una configuración  $\sigma_0$  donde todos los espines tienen igual orientación. Dado un campo  $\vec{B}$  el Hamiltoniano del sistema es

$$H = - \sum_j^N J \sigma_j \sigma_{j+1} - B \sum_j^N \sigma_j,$$

con  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ .

Un primer ensayo para obtener observables termodinámicos es considerar el caso cuando hay ausencia de un campo externo, es decir  $\vec{B} = 0$ , por lo cual la función de partición es

$$Z = \exp(\beta N J) \left( (1 - \exp(-2\beta J))^N + (1 + \exp(-2\beta J))^N \right),$$

que resulta ser una función analítica de la temperatura, por lo tanto también lo es la energía libre  $F$ , lo cual implica que no hay transición de fase.

Los resultados anteriores sirven para ilustrar la necesidad del límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  (ecuación I.20) si se busca una transición de fase, es por ello que en el caso  $\vec{B} \neq 0$

se considerará esa condición. Se inicia teniendo en cuenta la energía de un par de espines adyacentes

$$K(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = -\frac{B}{2}(\sigma_j + \sigma_{j+1}) - J\sigma_j\sigma_{j+1},$$

con  $j \in \{1, \dots, N\}$ , de manera que  $H = \sum_j K(\sigma_j, \sigma_{j+1})$ . Se define la *matriz de transferencia*

$$\tau = \begin{pmatrix} \exp \beta(J+B) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp \beta(J-B) \end{pmatrix},$$

y se cumple que la función de partición se puede expresar en términos de  $\tau$  :

$$Z = \text{Tr } \tau^N.$$

La matriz  $\tau$  tiene autovalores  $\lambda_{\pm} = \exp(\beta J) \left[ \cosh \beta B \pm \sqrt{\sinh^2 \beta B + \exp(-4\beta J)} \right]$ , motivo por el cual

$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N,$$

con la propiedad de que  $0 < \lambda_- < \lambda_+$ . Como la energía libre se puede obtener de la función de partición (ver el Apéndice), se tiene

$$F = -TN \log \lambda_+ - T \log(1 + (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^N),$$

por consiguiente para  $N$  suficientemente grande

$$M = \frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial B} \cong \frac{\sinh \beta B}{\sqrt{\sinh^2 \beta B + \exp(-4\beta J)}},$$

que converge a 0 cuando  $B \rightarrow 0$ , para toda temperatura, por lo tanto no hay transición de fase.

## B. El modelo de Ising bidimensional (d=2).

En este modelo se considera una rejilla cuadrada periódica similar a la mostrada en la figura XVI. Formalmente una rejilla con borde periódico consta de nodos o sitios  $\mathcal{S} = \{(i, j) : 1 \leq i, j \leq L\}$  y aristas  $\mathcal{A} = \{< x, y > = < y, x > : x, y \in \mathcal{S}; \|x - y\| = 1\}$  cuyas fronteras verifican  $(1, j) = (L+1, j)$  e  $(i, 1) = (i, L+1)$  para todo  $i, j \leq L$ . En cada nodo existe una partícula con espín aleatorio  $\pm 1$ , por consiguiente existe una colección de configuraciones de espines. En el siguiente gráfico se muestra una rejilla con  $7 \times 7$  nodos y partículas con espín +1 (rojo) y -1 (azul).

El modelo considera que el Hamiltoniano está dado por la ecuación II.1, en particular si  $\vec{B} = 0$ , se tiene

$$H = - \sum_{i \sim j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j,$$

o con la notación que se acaba de presentar

$$H = - \sum_{< x, y > \in \mathcal{A}} J_{xy} \sigma_x \sigma_y.$$

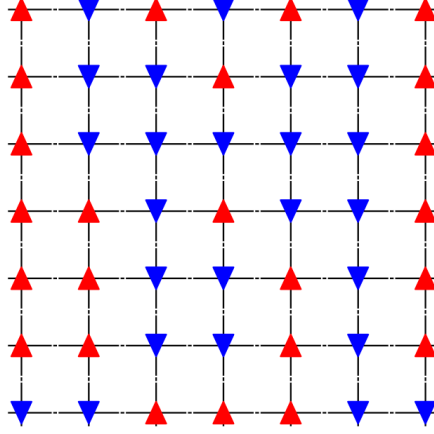


Figura XVII: Una posible configuración de espines.

Cada configuración  $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{L^2}\} \in \{\pm 1\}^{\{1, \dots, L^2\}}$  tiene asociada una energía  $-\sum_{\langle x, y \rangle \in \mathcal{A}} J_{xy} \sigma_x \sigma_y$  así como un peso estadístico dentro del colectivo canónico, igual a

$$\exp(\beta \sum_{\langle x, y \rangle \in \mathcal{A}} J_{xy} \sigma_x \sigma_y),$$

donde  $\beta$  es la **temperatura inversa** (más precisamente es el inverso de  $k_B T$ , con  $k_B$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura). Por lo tanto si se define la función de partición

$$Z = \sum_{\sigma} \exp(\beta \sum_{\langle x, y \rangle \in \mathcal{A}} J_{xy} \sigma_x \sigma_y), \quad (\text{II..2})$$

se obtiene que la probabilidad de la configuración  $\sigma$  es

$$\frac{\exp(\beta \sum_{\langle x, y \rangle \in \mathcal{A}} J_{xy} \sigma_x \sigma_y)}{Z}.$$

Este modelo fue resuelto de forma exacta por Onsager, quien demostró que existe una temperatura crítica positiva  $T_C$ , debajo de la cual ocurre una magnetización espontánea del material. Es digno resaltar el hecho de que el razonamiento heurístico hecho en la introducción del capítulo también preveía una transición en esta dimensión.

## 1. Solución analítica en dimensión 2.

Como se mencionó líneas arriba, Onsager encontró una solución exacta en dimensión 2 usando varias técnicas matemáticas. En el presente texto se muestra una variación de dicho desarrollo, más sencilla y corta. Debido a que la función de partición codifica toda la información estadística de un sistema termodinámico, el primer paso es tratar de reescribirla para obtener una expresión más apropiada, y para tal fin se usa un enfoque geométrico. Dentro de la rejilla cuadrada se pueden inscribir *polígonos*, definidos como sucesiones de aristas adyacentes, es decir  $\langle x_1, x_2 \rangle, \langle x_2, x_3 \rangle, \langle x_3, x_4 \rangle, \dots, \langle x_{n-1}, x_n \rangle$  sin aristas repetidas de manera que  $x_1 = x_n$ . Se define  $N_{pq}$  como el número de polígonos con  $p$  aristas horizontales y  $q$  verticales ( $p, q \leq 2L$ .)

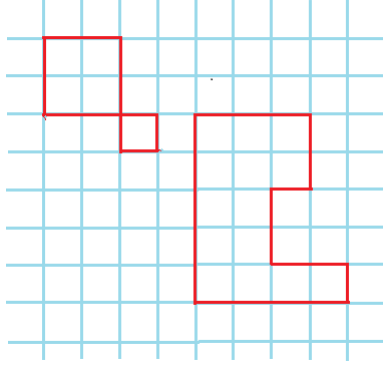


Figura XVIII: Fragmento de una rejilla cuadrada, donde el polígono izquierdo tiene 6 aristas horizontales y 6 verticales, mientras que el derecho tiene 10 aristas horizontales y 10 verticales.

**Lema B..1.** Si en el modelo bidimensional de Ising la constante de intercambio es constante e igual a  $J$ , entonces la función de partición II..2 se puede expresar en términos de las funciones  $N_{pq}$  :

$$Z = (2 \cosh^2(\beta J))^{L^2} \sum_{p,q} N_{pq} \tanh^{p+q}(\beta J),$$

donde  $\beta$  es la temperatura inversa.

**Demostración.** En base a la definición de la función de partición se tiene

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} \prod_{\langle x,y \rangle \in \mathcal{A}} \exp(\beta J \sigma_x \sigma_y) \\ &= \sum_{\sigma} \prod_{\langle x,y \rangle \in \mathcal{A}} (\exp(\beta J) \mathbb{1}_{\sigma_x = \sigma_y} + \exp(-\beta J) \mathbb{1}_{\sigma_x \neq \sigma_y}) \\ &= \sum_{\sigma} \prod_{\langle x,y \rangle \in \mathcal{A}} \cosh \beta J \left( \frac{2 \exp(\beta \sigma_x \sigma_y)}{\exp(\beta \sigma_x \sigma_y) + \exp(-\beta \sigma_x \sigma_y)} \right) \\ &= (\cosh(\beta J))^{2L^2} \sum_{\sigma} \prod_{\langle x,y \rangle \in \mathcal{A}} (1 + \tanh(\beta J) \sigma_x \sigma_y). \end{aligned}$$

Debido a que las potencias pares de  $\sigma_x$  son iguales a 1, y para potencias impares  $i$  se cumple  $\sum_{\sigma} \sigma_x^i = 0$ , entonces los sumandos en la expresión precedente son del tipo

$$1 \text{ ó } \tanh^n(\beta J) \sigma_{x_1} \sigma_{x_2} \sigma_{x_3} \sigma_{x_4} \dots \sigma_{x_{2n-1}} \sigma_{x_{2n}},$$

donde  $\langle x_{2i-1}, x_{2i} \rangle \in \mathcal{A}$  para todo  $i \leq n$ . Por la observación previa el producto  $\sigma_{x_1} \sigma_{x_2} \sigma_{x_3} \sigma_{x_4} \dots \sigma_{x_{2n-1}} \sigma_{x_{2n}}$  es igual a 1, mas para cuantificar todas las combinaciones posibles es oportuno establecer una conexión geométrica. Primero se nota que esta colección de aristas con sus respectivos nodos deben formar un ciclo, no debe usarse una arista más de una vez y cada nodo debe ser extremo de un número par de aristas, esto es, deben formar los polígonos definidos al principio, entonces

$$\sum_{\sigma} \prod_{\langle x,y \rangle \in \mathcal{A}} (1 + \tanh(\beta J) \sigma_x \sigma_y) = 2^{L^2} \sum_{p,q} N_{pq} \tanh^{p+q}(\beta J),$$

donde  $p$  y  $q$  son naturales pares menores o iguales a  $2L$ , con lo cual se concluye que la función  $Z$  es igual a

$$(2 \cosh^2(\beta J))^{L^2} \sum_{p,q} N_{pq} \tanh^{p+q}(\beta J).$$

□

En este punto se decide abordar el problema del modelo bidimensional de Ising transformándolo en un problema de **dímeros** (también llamados empaquetamiento de dímeros). Los dímeros son colecciones de nodos o vértices, de manera que cada uno de ellos está conectado con uno y sólo uno de sus vecinos, como se aprecia en el apéndice D. La teoría de dímeros es vasta y está muy desarrollada, es por ello que se decide transformar el problema original a este nuevo contexto.

El primer paso es reemplazar cada nodo de la red cuadrada por un **clúster** de 6 nuevos nodos o vértices:

- L: *left*, R: *right*, U: *upper*, D: *down*, 1 y 2

junto a 7 nuevas aristas como se aprecia en la siguiente gráfica:

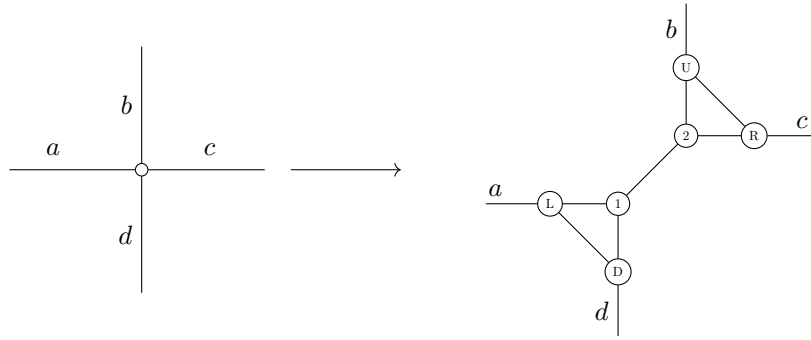


Figura XIX: Un nodo se transforma en un clúster.

Las aristas originales de la red cuadrada se mantienen en la nueva red (  $a, b, c, d$  ) y se denominan *aristas entre clústeres*.

Como ilustración se ve cómo un fragmento de una rejilla cuadrada se asocia a una red de clústeres:

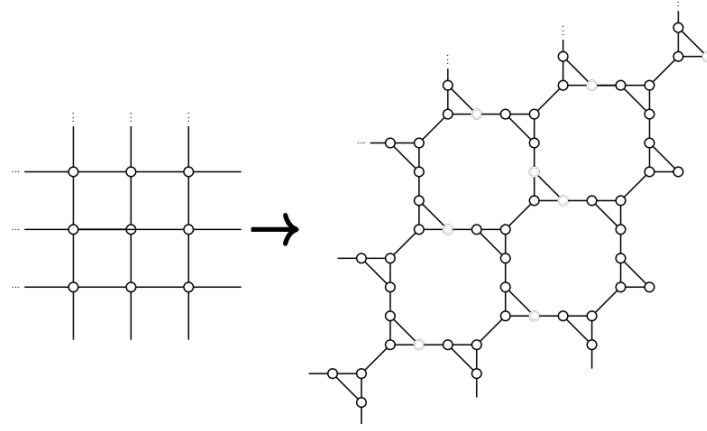
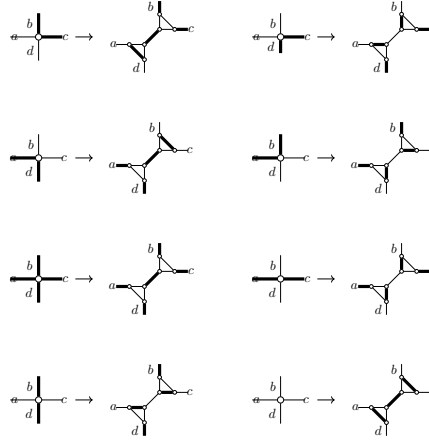


Figura XX: Transformación de una rejilla cuadrada introduciendo clústeres.

Debido a que los polígonos o ciclos embebidos en la rejilla cuadrada del lema anterior están formados por aristas que no deben usarse más de una vez, y por nodos que son extremos de un número par de aristas, entonces dado un nodo, sus 4 aristas pueden formar 8 configuraciones diferentes, y existe una correspondencia biyectiva entre éstas y 8 configuraciones de empaquetamiento de dímeros del respectivo clúster:



1

Figura XXI: Configuraciones de aristas cerradas alrededor de un nodo y sus contrapartes en un empaquetamiento de dímeros.

El empaquetamiento de dímeros tiene 3 tipos de aristas: las horizontales entre clústeres, las verticales entre clústeres y las de cualquier tipo dentro de los clústeres. Las aristas cerradas del primer y segundo tipo tienen peso  $\tanh \beta J$  mientras que los del tercer tipo tienen peso 1, por lo tanto este empaquetamiento tiene función generatriz

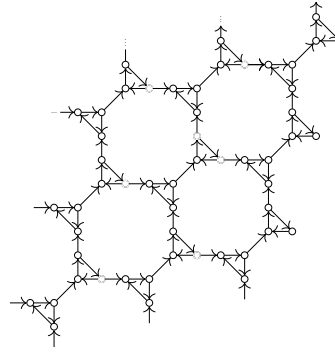
$$Z' = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} g(n_1, n_2, n_3) \tanh^{n_1+n_2} \beta J,$$

donde  $g(n_1, n_2, n_3)$  es el número de configuraciones con  $n_1$  aristas cerradas del primer tipo, con  $n_2$  aristas cerradas del segundo y  $n_3$  del tercero. Esta función tiene la valiosa propiedad de

$$Z' = Z, \quad (\text{II.3})$$

debido a la correspondencia uno a uno ilustrada en la figura previa, lo cual se traslada a una correspondencia biyectiva entre los polígonos de la rejilla original y los empaquetamientos de dímeros, por consiguiente la función de partición  $Z$  es igual  $Z'$ .

Como se muestra en el apéndice, para poder expresar la función generatriz de un empaquetamiento de dímeros como el Pfaffiano de una matriz, es necesario darle una orientación apropiada a la rejilla (ver ??), esto es asignarle una dirección a cada arista para sistematizar los cálculos, en particular se elije:



1

Figura XXII: Rejilla orientada.

La orientación seleccionada se corresponde con la siguiente definición de la matriz  $A$ , cuyas entradas son a su vez matrices  $6 \times 6$  :

►Para un clúster  $(j, k)$ , donde  $R, L, U, D, 1, 2$  simbolizan sus nodos (ver Figura XIX)

$$A(j, k, j, k)$$

$$= \begin{matrix} & \begin{matrix} R & L & U & D & 1 & 2 \end{matrix} \\ \begin{matrix} R \\ L \\ U \\ D \\ 1 \\ 2 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

para  $1 \leq j, k \leq L$ ,

y como muestra, la entrada con fila  $U$  y columna  $R$  es  $+1$ , es decir en la rejilla orientada existe una flecha que parte del nodo  $U$  y arriba al nodo  $R$ .

► Para una arista horizontal entre los clústeres  $(j, k)$  y  $(j, k + 1)$  :

$$A(j, k, j, k + 1) = -A^T(j, k + 1, j, k)$$

$$= \begin{matrix} & R & L & U & D & 1 & 2 \\ \begin{matrix} R \\ L \\ U \\ D \\ 1 \\ 2 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & \tanh \beta J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

$$\text{para } 1 \leq j \leq L, 1 \leq k \leq L - 1,$$

que muestra que en la rejilla orientada parte una flecha del nodo  $R$  de un clúster y llega al nodo  $L$  del clúster adyacente a la derecha.

► Para una arista vertical entre clústeres  $(j, k)$  y  $(j + 1, k)$  :

$$A(j, k, j + 1, k) = -A^T(j + 1, k, j, k)$$

$$= \begin{matrix} & R & L & U & D & 1 & 2 \\ \begin{matrix} R \\ L \\ U \\ D \\ 1 \\ 2 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tanh \beta J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

$$\text{para } 1 \leq j \leq L - 1, 1 \leq k \leq L,$$

que muestra que en la rejilla orientada parte una flecha del nodo  $U$  de un clúster y que llega al nodo  $D$  del clúster adyacente superior. Se debe tener la precaución de no confundir  $L$  cuando aparece en las matrices y denota un nodo left y cuando representa la cantidad de nodos de la rejilla cuadrada de Ising.

Debido a que el modelo de Ising tiene bordes periódicos, el nuevo modelo de empaquetamiento hereda esta característica, por ello y de forma similar a lo presentado en Apéndice D, se definen 4 matrices a partir de  $A$ , de manera que en las coordenadas del tipo  $((j, k), (j, k))$ ,  $((j, k), (j, k + 1))$ ,  $((j, k), (j + 1, k))$  tienen las mismas entradas que  $A$ , pero en los bordes periódicos se definen nuevas entradas:

$$A_1(j, L, j, 1) = -A_1^T(j, 1, j, L) := A(j, 1, j, 2) \text{ para } 1 \leq j \leq L,$$

$$A_1(L, k, 1, k) = -A_1^T(1, k, L, k) := A(1, k, 2, k) \text{ para } 1 \leq k \leq L,$$

$$A_2(j, L, j, 1) = -A_2^T(j, 1, j, L) := A(j, 1, j, 2) \text{ para } 1 \leq j \leq L,$$

$$A_2(L, k, 1, k) = -A_2^T(1, k, L, k) := -A(1, k, 2, k) \text{ para } 1 \leq k \leq L,$$

$$A_3(j, L, j, 1) = -A_3^T(j, 1, j, L) := -A(j, 1, j, 2) \text{ para } 1 \leq j \leq L,$$

$$A_3(L, k, 1, k) = -A_3^T(1, k, L, k) := A(1, k, 2, k) \text{ para } 1 \leq k \leq L,$$

$$A_4(j, L, j, 1) = -A_4^T(j, 1, j, L) := -A(j, 1, j, 2) \text{ para } 1 \leq j \leq L,$$

$$A_4(L, k, 1, k) = -A_4^T(1, k, L, k) := -A(1, k, 2, k) \text{ para } 1 \leq k \leq L.$$

La razón de definir las matrices precedentes es para usarlas en el cálculo de la función de partición.

**Proposición B..1.** *Se verifica que para una rejilla cuadrada periódica con  $L$  nodos en cada lado la función  $Z$  es igual a*

$$\frac{1}{2}(2 \cosh^2 \beta J)^{L^2} (-Pf A_1 + Pf A_2 + Pf A_3 + Pf A_4), \quad (\text{II..4})$$

donde  $Pf$  es el Pfaffiano. Adicionalmete en el límite termodinámico la energía libre de Helmholtz es igual a

$$F = -\frac{1}{\beta} \left[ \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log \left( \cosh^2 2\beta J - \sinh 2\beta J \cos \theta_1 - \sinh 2\beta J \cos \theta_2 \right) d\theta_2 d\theta_1 + \log 2 \right].$$

**Demostración.** En el Apéndice se menciona que la función generatriz de un empaquetamiento de dímeros en una red cuadrada es proporcional a la suma de 4 Pfaffianos (ver la ecuación 6), la prueba para la igualdad II..4 es similar.

La proposición ..8 permite obtener las igualdades

$$(Pf A_i)^2 = \det A_i \quad \forall 1 \leq i \leq 4, \quad (\text{II..5})$$

además todas las matrices  $A_i$  tienen dimensiones  $6L^2 \times 6L^2$ , o equivalentemente son matrices con dimensión  $L^2 \times L^2$  cuyas entradas son a su vez matrices  $6 \times 6$ . Cada una de estas matrices  $6 \times 6$  se puede transformar, sumando y restando columnas, en matrices por bloques

$$A(j, k, j, k) \rightarrow \left( \begin{array}{cccc|cc} 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{array} \right), \quad 1 \leq j, k \leq L,$$

por su parte  $A(j, k, j, k+1)$ ,  $A(j, k+1, j, k)$ ,  $A(j, k, j+1, k)$  y  $A(j+1, k, j, k)$ ,  $1 \leq j, k \leq L$  ya eran matrices por bloques y no se modifican con la transformación. Se colige entonces que el determinante de las matrices  $A(j, k, j, k)$  es igual al determinante de sus bloques superiores izquierdos, de dimensión  $4 \times 4$ , y por otro lado de las demás matrices también se extraen los bloques superiores izquierdos, de dimensión  $4 \times 4$ . Posteriormente todas las matrices  $6 \times 6$  se reemplazan por sus bloques respectivos, y se obtiene nuevas matrices antisimétricas  $A'_i$  de dimensiones  $4L^2 \times 4L^2$   $1 \leq i \leq 4$ . El determinante de una matriz se puede obtener de los determinantes de sus submatrices (ver la proposición ..5 en el apéndice) y por lo expuesto anteriormente se deduce la igualdad

$$\det A_i = \det A'_i,$$

para todo  $1 \leq i \leq 4$ . Para calcular el determinante de estas últimas se introducen las matrices auxiliares de dimensión  $n \times n$ ,  $n \geq 1$

$$H_n := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\tilde{H}_n := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

gracias a los cuales se pueden expresar las matrices  $A'_i$  como sumas de productos de Kronecker:

$$\begin{aligned} A'_i = & I_L \otimes I_L \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} + I_L \otimes M \otimes \begin{pmatrix} 0 & \tanh \beta J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & + I_L \otimes M^T \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\tanh \beta J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + N \otimes I_L \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tanh \beta J \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & + N^T \otimes I_L \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\tanh \beta J & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{II.6})$$

donde

$$M = \begin{cases} H_L & \text{para } i = 1, 2, \\ \tilde{H}_L & \text{para } i = 3, 4, \end{cases}$$

$$N = \begin{cases} H_L & \text{para } i = 1, 3, \\ \tilde{H}_L & \text{para } i = 2, 4, \end{cases}$$

$I_L$  es la matriz identidad de dimensión  $L \times L$  y el superíndice  $T$  denota la transpuesta. Analizando las matrices  $H_L$  y  $\tilde{H}_L$  se encuentra que ambas son unitarias, es decir

$$H_L H_L^T = I_L, \quad \tilde{H}_L \tilde{H}_L^T = I_L,$$

además por ser cíclica y cuasicíclica, respectivamente, los autovalores de la primera son

$$\exp \frac{2l}{L} \pi i, \quad l \leq L \quad (\text{II.7})$$

y los de la segunda

$$\exp \frac{2l-1}{L} \pi i, \quad l \leq L, \quad (\text{II.8})$$

con  $i = \sqrt{-1}$ . Por lo anterior se deduce que existe una matriz unitaria  $E$ , cuyas columnas son autovectores de  $H_L$ , de manera que el producto

$$\Lambda := E^{-1} H_L E$$

es una matriz diagonal cuyas entradas no nulas son los autovalores II.7, adicionalmente el producto

$$\Lambda' := E^{-1} H_L^T E$$

tambi3n es una matriz diagonal, pero cuyas entradas no nulas son las inversas de los valores en II.7. De forma paralela existe una matriz unitaria  $\tilde{E}$ , cuyas columnas son autovectores de  $\tilde{H}_L$ , de tal forma que los productos

$$\Gamma := \tilde{E}^{-1} \tilde{H}_L \tilde{E} \text{ y } \Gamma' := \tilde{E}^{-1} \tilde{H}_L^T \tilde{E}$$

son diagonales, donde las entradas diferentes a cero de la primera son los valores en II.8 y las de la segunda son sus inversas.

En la ecuaci3n II.6 se tienen 5 sumandos, en cada uno de los cuales est1 expl3cita una matriz  $4 \times 4$ , que en concordancia con el orden en que aparecen se denotan como  $F_1, F_2, F_3, G_1$  y  $G_2$ , por lo que (ver la proposici3n ..6 en el ap3ndice) para  $i = 2$  se verifica

$$\begin{aligned} A_2 &= I_L \otimes I_L \otimes F_1 + I_L \otimes H_L \otimes F_2 \\ &+ I_L \otimes H_L^T \otimes F_3 + \tilde{H}_L \otimes I_L \otimes G_1 + \tilde{H}_L^T \otimes I_L \otimes G_2 \\ &= I_L \otimes I_L \otimes F_1 + I_L \otimes (E \Lambda E^{-1}) \otimes F_2 + I_L \otimes (E \Lambda' E^{-1}) \otimes F_3 \\ &+ (\tilde{E} \Gamma \tilde{E}^{-1}) \otimes I_L \otimes G_1 + (\tilde{E} \Gamma' \tilde{E}^{-1}) \otimes I_L \otimes G_2 \\ &= (\tilde{E} \otimes E \otimes I_L) \left[ I_L \otimes I_L \otimes F_1 + I_L \otimes \Lambda \otimes F_2 + I_L \otimes \Lambda' \otimes F_3 \right. \\ &\left. + \Gamma \otimes I_L \otimes G_1 + \Gamma' \otimes I_L \otimes G_2 \right] (\tilde{E}^{-1} \otimes E^{-1} \otimes I_L), \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} \det A_2 &= \det \left[ I_L \otimes I_L \otimes F_1 + I_L \otimes \Lambda \otimes F_2 + I_L \otimes \Lambda' \otimes F_3 \right. \\ &\left. + \Gamma \otimes I_L \otimes G_1 + \Gamma' \otimes I_L \otimes G_2 \right]. \end{aligned}$$

De la ecuaci3n anterior y del hecho que hay matrices diagonales involucradas se tiene

$$\begin{aligned} \det A_2 &= \prod_{j=1}^L \det \left[ I_L \otimes F_1 + \Lambda \otimes F_2 + \Lambda' \otimes F_3 + \gamma_j I_L \otimes G_1 + \gamma'_j I_L \otimes G_2 \right] \\ &= \prod_{j=1}^L \prod_{k=1}^L \det \left[ F_1 + \lambda_k F_2 + \lambda'_k F_3 + \gamma_j G_1 + \gamma'_j G_2 \right] \\ &= \prod_{j=1}^L \prod_{k=1}^L \det \begin{pmatrix} 0 & 1 + \lambda_k z & -1 & -1 \\ -1 - \lambda'_k z & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 + \gamma_j z \\ 1 & 1 & -1 - \gamma'_j z & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

donde  $z = \tanh \beta J$ ,  $\gamma_j$  y  $\lambda_k$  son los n3meros en II.7 y II.8 respectivamente, adem1s  $\gamma'_j$  y  $\lambda'_k$  son sus correspondientes inversos.

El argumento anterior se puede extender para las dem1s matrices  $A_i$ , demostr1ndose que

$$\begin{aligned} \det A_i &= \prod_{\theta_1} \prod_{\theta_2} \det \begin{pmatrix} 0 & 1 + z\theta_1 & -1 & -1 \\ -1 - z\theta_1^{-1} & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 + z\theta_2 \\ 1 & 1 & -1 - z\theta_2^{-1} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

con  $z = \tanh \beta J$ , donde el primer producto es sobre  $\theta_1$  en (II.7) para  $i = 1, 2$  y sobre (II.8) para  $i = 3, 4$ ; por su parte el segundo producto es sobre  $\theta_2$  en (II.7) para  $i = 1, 3$  y en (II.8) para  $i = 2, 4$ . El determinante de  $A_i$  por lo tanto cumple

$$\det A_i \quad (II.9)$$

$$= \prod_{\alpha_1} \prod_{\alpha_2} \left[ (1 + z^2)^2 - 2z(1 - z^2)(\cos \alpha_1 + \cos \alpha_2) \right],$$

donde el primer producto es sobre  $\alpha_1$  en  $\frac{2l\pi}{L}$ ,  $1 \leq l \leq L$  para  $i = 1, 2$  y sobre  $\frac{(2l-1)\pi}{L}$ ,  $1 \leq l \leq L$  para  $i = 3, 4$ , en tanto que el segundo producto es sobre  $\alpha_2$  en  $\frac{2l\pi}{L}$ ,  $1 \leq l \leq L$  para  $i = 1, 3$  y sobre  $\frac{(2l-1)\pi}{L}$ ,  $1 \leq l \leq L$  para  $i = 2, 4$ .

En virtud de la ecuación (II.4) se tiene una expresión para la función de partición, y por la igualdad II.5 se tiene

$$Z = \frac{1}{2} (2 \cosh^2 \beta J)^{L^2} \left[ -(\pm \det^{\frac{1}{2}} A_1) + (\pm \det^{\frac{1}{2}} A_2) + (\pm \det^{\frac{1}{2}} A_3) + (\pm \det^{\frac{1}{2}} A_4) \right],$$

donde la elección de los signos  $+$  o  $-$  dentro de los paréntesis depende de la temperatura, de hecho para temperaturas menores a un cierto valor (cuando se defina la temperatura crítica se verá que coincide con dicho valor) los signos son  $(+, +, +, +)$  y para magnitudes mayores son  $(-, +, +, +)$  (ver 18p.106-107). Afortunadamente en el límite termodinámico esto se vuelve irrelevante por lo que se puede asumir que los cuatro signos son  $+$ . En las ecuaciones II.9 el determinante depende del tamaño de las rejillas, es decir de  $L$ , por consiguiente

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^2} \log Z = -\frac{1}{\beta} \left[ \log 2 \cosh^2 \beta J \right. \\ &+ \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^2} \log \left[ -\det^{\frac{1}{2}} A_1(L) + \det^{\frac{1}{2}} A_2(L) + \det^{\frac{1}{2}} A_3(L) + \det^{\frac{1}{2}} A_4(L) \right] \\ &= -\frac{1}{\beta} \left[ \log 2 \cosh^2 \beta J + \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^2} [\log \det^{\frac{1}{2}} A_2(L) + o(L^2)] \right] \\ &= -\frac{1}{\beta} \left[ \log 2 \cosh^2 \beta J + \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^2} \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha_2} \log[(1 + z^2)^2 \right. \\ &\quad \left. - 2z(1 - z^2)(\cos \alpha_1 + \cos \alpha_2)] \right] \\ &= -\frac{1}{\beta} \left[ \log 2 \cosh^2 \beta J + \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log[(1 + z^2)^2 \right. \\ &\quad \left. - 2z(1 - z^2)(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)] d\theta_2 d\theta_1 \right], \end{aligned}$$

donde la última expresión se puede transformar fácilmente en la expresión enunciada en la proposición, usando el hecho de que  $z = \tanh \beta J$ , lo que culmina la demostración.  $\square$

Ahora que se tiene la energía libre  $F$  se puede evaluar su comportamiento en función de la temperatura, todo esto para ver si se produce una transición de fase.

En la siguiente proposición se usan herramientas de análisis en variable compleja para calcular integrales, en particular para computar expresiones del tipo

$$\int \log f(w) dw,$$

con  $f$  una función holomorfa con singularidades aisladas y  $\log$  la función logaritmo (ver el Apéndice.)

**Proposición B..2.** Existe una temperatura crítica  $T_C > 0$  donde la energía libre  $F$  no es analítica.

**Demostración.** Por el teorema precedente se tiene la siguiente expresión

$$F = -\frac{1}{\beta} \left[ \log 2 \cosh^2 \beta J + \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \log[(1+z^2)^2 - 2z(1-z^2)(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)] d\theta_2 d\theta_1 \right],$$

con  $z = \tanh \beta J$ . Analizando la estructura analítica del integrando, se observa que los puntos de ramificación de la función

$$f(w) = \log[(1+z^2)^2 - 2z(1-z^2)\cos \theta_1 - z(1-z^2)(w+w^{-1})], \quad w \in \mathbb{C}$$

son  $0, \infty, \alpha(\theta_1)$  y su inversa  $\alpha^{-1}(\theta_1)$ , donde las funciones  $\alpha, \alpha^{-1}$  se definen como

$$\alpha^{\pm 1}(\theta) := \frac{1}{2} \frac{1}{z(1-z^2)} \left[ (1+z^2)^2 - 2z(1-z^2)\cos \theta \pm (1-z^2) \left( (1-\alpha_1 \exp i\theta)(1-\alpha_1 \exp -i\theta) \left(1 - \frac{1}{\alpha_2} \exp i\theta\right) \left(1 - \frac{1}{\alpha_2} \exp -i\theta\right) \right)^{\frac{1}{2}} \right],$$

con

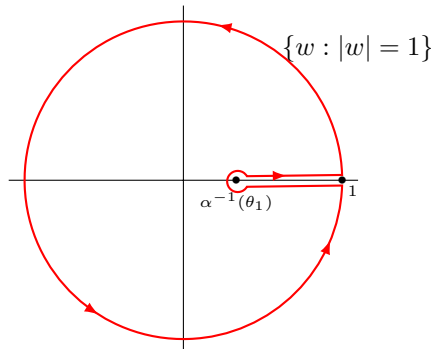
$$\alpha_1 = \frac{z(1-|z|)}{1+|z|} \quad \text{y} \quad \alpha_2 = \frac{1-|z|}{z(1+|z|)}.$$

Se observa que  $\alpha(\theta_1)$  y  $\alpha^{-1}(\theta_1)$  dependen de la temperatura, por lo que al variar esta pueden acercarse o distanciarse pero nunca coinciden, ya que  $|\alpha(\theta_1)| > 1 > |\alpha^{-1}(\theta_1)|$ .

Haciendo uso de lo anterior, con  $\alpha := \alpha(\theta_1)$ , se llega a la igualdad

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \log[(1+z^2)^2 - 2z(1-z^2)(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)] d\theta_2 \\ &= \int_0^{2\pi} \log[(\exp i\theta_2 - \alpha)(\alpha^{-1} \exp(-i\theta_2) - 1)z(1-z^2)] d\theta_2 \\ &= \oint_{w:|w|=1} \frac{1}{iw} \log((w - \alpha)(\alpha^{-1}w^{-1} - 1)z(1-z^2)) dw, \end{aligned}$$

donde el integrando en la última línea tiene su propia estructura analítica, con puntos de ramificación  $\alpha^{-1}, \alpha$  y donde el punto  $w = 0$  es una singularidad aislada. La última integral se calcula aproximando con integrales de contorno de curvas obtenidas al deformar  $\{w : |w| = 1\}$  para evitar el corte de ramificación que va de  $\alpha^{-1}$  hasta  $\alpha$ , como se muestra en el siguiente gráfico



En cada integral con contorno deformado se puede usar el teorema del resto de Cauchy (ver el Apéndice, teorema ..7), con singularidad en  $w = 0$ . Posteriormente los contornos modificados se hacen progresivamente más parecidos a la curva original, obteniéndose en el límite

$$\oint_{w:|w|=1} \frac{1}{iw} \log((w - \alpha)(\alpha^{-1}w^{-1} - 1)z(1 - z^2))dw = 2\pi \log \alpha z(1 - z^2),$$

por lo que la doble integral al inicio de la prueba es igual a

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \log \alpha(\theta_1) z(1 - z^2) d\theta_1.$$

Al estudiar la configuración analítica del integrando previo se tienen los puntos de corte  $\alpha_1, \alpha_1^{-1}, \alpha_2$  y  $\alpha_2^{-1}$ , que dependen por definición de la temperatura, mas en este caso dichos puntos pueden coincidir al cambiar la temperatura, en cuya situación la integral deja de ser analítica. Específicamente ocurre que

$$|\alpha_2| = 1 \quad \text{si} \quad z = \frac{1 - |z|}{1 + |z|},$$

por lo tanto se infiere que existe una única temperatura  $T_c > 0$ , que verifica

$$\tanh \frac{J}{k_B T_c} = \frac{1 - \tanh \frac{J}{k_B T_c}}{1 + \tanh \frac{J}{k_B T_c}},$$

y donde la energía libre  $F$  no es analítica. Finalmente por métodos numéricos se estima que

$$T_c \sim 2.2691 \frac{J}{k_B},$$

en grados Kelvin. □

La proposición precedente indica una transición de fase en el modelo de Ising bidimensional, debido a que diversas magnitudes físicas como el calor específico o la magnetización espontánea se obtienen derivando la energía libre de Helmholtz. Es también importante ver el comportamiento de estas magnitudes en las inmediaciones del punto crítico, la forma en la que divergen, por lo que en ese afán se enuncia previamente el siguiente lema.

**Lema B..3.** *Sean las siguientes funciones, que se definen mediante integrales elípticas*

$$E(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - k^2 \sin^2 w)^{\frac{1}{2}} dw,$$

$$K(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dw}{(1 - k^2 \sin^2 w)^{\frac{1}{2}}}, \quad k > 0.$$

*Se verifica que cuando  $k \rightarrow 1$ , la primera función converge a 1 mientras que la segunda diverge a  $+\infty$ , de hecho si  $k'^2 := 1 - k^2$ , entonces*

$$K(k) = \log \frac{4}{|k'|} + O(k'^2 \log |k'|).$$

*Por otro lado, si  $k$  depende de la temperatura inversa  $\beta$  mediante la ecuación  $k = k(\beta) := 2 \frac{\sinh \beta J}{\cosh^2 \beta J}$ , entonces se verifica la igualdad*

$$\frac{dK}{dk} = \frac{1}{kk'^2} [E(k) - k'^2 K(k)].$$

**Demostración.** La convergencia de  $E$  y la divergencia de  $K$  se prueban usando los teoremas de convergencia dominada y acotando apropiadamente el integrando, respectivamente. Para la segunda parte se observa que  $k \rightarrow 1$  implica  $k' \rightarrow 0$  y se reescribe  $K$  de la siguiente manera

$$K(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dw}{(\cos^2 w + k'^2 \sin^2 w)^{\frac{1}{2}}}.$$

Se elige un  $\epsilon > 0$  suficientemente pequeño tal que  $\frac{\epsilon}{|k'|} \gg 1$  y  $\frac{1}{\epsilon} \gg 1$ , para posteriormente dividir la integral anterior en dos partes

$$K(k) = \underbrace{\int_{\frac{\pi}{2}-\epsilon}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dw}{(\cos^2 w + k'^2 \sin^2 w)^{\frac{1}{2}}}}_I + \underbrace{\int_0^{\frac{\pi}{2}-\epsilon} \frac{dw}{(\cos^2 w + k'^2 \sin^2 w)^{\frac{1}{2}}}}_{II},$$

y en primer lugar se aborda el término I:

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{\epsilon} \frac{dt}{(\sin^2 t + k'^2 \cos^2 t)^{\frac{1}{2}}} = \int_0^{\epsilon} \frac{dt}{(k'^2 + k^2 t^2 + o(t^2))^{\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{1}{k} \log\left(\frac{\sqrt{k'^2 + k^2 \epsilon^2} + k\epsilon}{k'}\right) + o(1) = \log\left(\frac{2\epsilon}{k'}\right) + o(1). \end{aligned}$$

En lo concerniente al segundo término se nota que para  $w \in [0, \frac{\pi}{2} - \epsilon]$  se verifica

$$\begin{aligned} k'^2 \sin^2 w &\leq k'^2 + o(\epsilon^2) = O(k'^2) \text{ y} \\ \cos^2 w &\geq \epsilon^2 + o(\epsilon^2), \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} II &= \int_0^{\frac{\pi}{2}-\epsilon} \frac{dw}{(\cos^2 w + O(k'^2))^{\frac{1}{2}}} = \int_0^{\frac{\pi}{2}-\epsilon} \frac{dw}{\cos w} + \int_0^{\frac{\pi}{2}-\epsilon} O(k'^2) \frac{dw}{\cos^3 w} \\ &= \log\left(\frac{2}{\epsilon}\right) + O(k'^2 \log k'), \end{aligned}$$

por consiguiente al adicionar I y II se obtiene que

$$K(k) = \log\left(\frac{4}{k'}\right) + O(k'^2 \log k').$$

Para la expresión final sea  $\Delta = (1 - k^2 \sin^2 w)^{\frac{1}{2}}$ , entonces es fácil verificar que la derivada de  $K$  satisface

$$\begin{aligned} \frac{dK}{dk} &= k \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2 w}{\Delta^3} dw \\ &= \frac{1}{k} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{1}{\Delta^3} - \frac{1}{\Delta} \right) dw = \frac{1}{k} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\Delta^3} dw - \frac{1}{k} K(k). \end{aligned}$$

Para simplificar la última integral, se usa la siguiente identidad

$$\frac{1}{\Delta^3} = \frac{\Delta}{k'^2} - \frac{k^2}{k'^2} \frac{d}{dw} \left( \frac{\sin w \cos w}{\Delta} \right),$$

lo que automáticamente prueba el lema. □

En la parte final del lema precedente se escribió  $k$  como función de  $\beta$  (y por lo tanto de la temperatura  $T$ ), de lo cual se deduce la relación

$$T \rightarrow T_C \text{ si y sólo si } k \uparrow 1,$$

mas aun, se obtienen las expresiones

$$k \sim 1 - 4\beta_C^2 E^2 \left( \frac{T}{T_C} - 1 \right)^2$$

$$k' \sim 2\sqrt{2}\beta_C E \left( \frac{T}{T_C} - 1 \right)$$

que serán utilizadas conjuntamente con el lema previo en la prueba de la siguiente proposición.

**Proposición B..4.** *El calor específico de un sistema de Ising bidimensional, tiene en el límite termodinámico una divergencia logarítmica en la temperatura crítica  $T_c$ . Específicamente*

$$c = \frac{2}{\pi} \log^2(1 + \sqrt{2}) \left( -\log \left| \frac{T}{T_c} - 1 \right| - 1 - \frac{\pi}{4} - \log \left( \frac{\sqrt{2}}{4} \log(1 + \sqrt{2}) \right) \right).$$

**Demostración.** Partiendo de la proposición B..1, con  $k$  como en el lema previo, y substituyendo  $w_1 = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$ ,  $w_2 = \frac{\theta_1 - \theta_2}{2}$ , se tiene otra expresión para la energía libre  $F$ :

$$F = -\frac{1}{\beta} \left( \log(2 \cosh \beta J) + \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\pi} \log(1 - k \cos w_1 \cos w_2) dw_1 dw_2 \right)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \left( \log(\sqrt{2} \cosh \beta J) + \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \log(1 - (1 - k^2 \sin^2 w_2)^{\frac{1}{2}}) dw_2 \right).$$

Con esta nueva representación se calcula la energía interna del sistema

$$< H > = \frac{\partial \beta F}{\partial \beta} = -2J \tanh 2\beta J + k \frac{dk}{d\beta} \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2 w}{\Delta(\Delta + 1)} dw,$$

donde  $\Delta = (1 - k^2 \sin^2 w)^{\frac{1}{2}}$ . Haciendo uso de las funciones auxiliares introducidas en el lema precedente, la energía interna se puede reescribir como

$$< H > = -2J \tanh 2\beta J + \frac{1}{k\pi} \frac{dk}{d\beta} (K(k) - \frac{\pi}{2}),$$

y debido a la definición de  $k$ , se obtiene

$$< H > = -J \coth 2\beta J \left[ 1 + \frac{2}{\pi} (2 \tanh^2 2\beta J - 1) K(k) \right],$$

lo que permite obtener una expresión para el calor específico

$$c = \frac{\partial < H >}{\partial T} = -\frac{1}{k_0 T^2} \frac{\partial < H >}{\partial \beta}$$

$$= \frac{J}{k_0 T^2} \left[ -2J \operatorname{csch}^2 2\beta J \left( 1 + \frac{2}{\pi} (2 \tanh^2 2\beta J - 1) K(k) \right) \right.$$

$$\left. + \frac{16}{\pi} J \operatorname{sech}^2 2\beta J K(k) + \frac{2}{\pi} \coth 2\beta J \left( 2 \tanh^2 2\beta J - 1 \right) \frac{dk}{d\beta} \frac{dK}{dk} \right],$$

donde  $k_0$  es la constante de Boltzmann. Si se aplica el lema previo se tiene una nueva expresión para  $c$ :

$$c = \frac{2k_0}{\pi} (\beta J \cosh 2\beta J)^2 \left[ 2K(k) - 2E(k) - (1 - k') \left( \frac{\pi}{2} + k' K(k) \right) \right],$$

y en las inmediaciones de la temperatura crítica, es decir cuando  $T \rightarrow T_C$ , se obtiene

$$\begin{aligned} c &\sim \frac{8}{\pi}(\beta_C E)^2 \left( \log \frac{4}{k'} - 1 - \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{2}{\pi} \log^2(1 + \sqrt{2}) \left[ -\log \left| \frac{T}{T_C} - 1 \right| - 1 - \frac{\pi}{4} - \log \left( \frac{\sqrt{2}}{4} \log(1 + \sqrt{2}) \right) \right]. \end{aligned}$$

□

### III. Algoritmos.

En el presente capítulo se presentan diversos algoritmos para estimar observables como la magnetización, susceptibilidad magnética, calor específico, etc de un sistema de espines. Se inicia con algoritmos que consideran todos los microestados posibles, para posteriormente abordar aquellos que recorren aleatoriamente (Montecarlo) el espacio de configuraciones, con particular énfasis en aquellos que involucran cambios grupales de espines entre configuraciones sucesivas (Algoritmos tipo clúster).

#### A. Enumeración de microestados.

El primer método a tratar es el del conteo o enumeración de todas las configuraciones posibles, calculando la energía de cada una de ellas. Debido a que la función de partición de un sistema lo describe estadísticamente, si se enumeran las configuraciones adecuadamente se pueden calcular la energía media, la magnetización media, etc. Para el caso simple de una rejilla  $2 \times 2$  se puede empezar con la configuración  $(-, -, -, -)$ , luego se sigue con  $(+, -, -, -)$ ,  $(+, +, -, -)$ , etc, invirtiendo un espín a la vez.

$$(-, -, -, -) \longrightarrow (+, -, -, -) \longrightarrow (+, +, -, -) \longrightarrow (-, +, -, -) \longrightarrow \dots$$

Figura XXIII: Enumeración sucesiva de configuraciones.

Para rejillas con un número mayor de nodos surge el problema de cómo ordenar sistemáticamente los microestados, para lo cual se usa el *código de Gray* (ver [15]), que generaliza el procedimiento anterior y permite enumerar todas las posibles configuraciones. La colección de todas las configuraciones tiene asociada un conjunto de energías posibles  $\{E\}$ , de manera que si  $N(E)$  es el número de conformaciones con energía  $E$ , la función de partición se puede reescribir como

$$Z = \sum_E N(E) \exp(-\beta E),$$

lo cual permite determinar algunas magnitudes:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_E E N(E) \exp(-\beta E), \\ \langle E^2 \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_E E^2 N(E) \exp(-\beta E), \\ c_v &= \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \end{aligned} \quad (\text{III..1})$$

Para ilustrar el alcance de este método, se considera una red de  $6 \times 6$  espines y por lo tanto con  $2^{36}$  configuraciones. Por simplicidad se asume también que los bordes son periódicos, entonces se tiene la siguiente distribución de la función  $N$  :

Tabla III: N para las distintas energías E.

| E  | N( $\pm E$ ) | E  | N( $\pm E$ ) |
|----|--------------|----|--------------|
| 0  | 13172279424  | 36 | 3846576      |
| 4  | 11674988208  | 40 | 804078       |
| 8  | 8196905106   | 44 | 159840       |
| 12 | 4616013408   | 48 | 35148        |
| 16 | 2122173684   | 52 | 6048         |
| 20 | 808871328    | 56 | 1620         |
| 24 | 260434986    | 60 | 144          |
| 28 | 71789328     | 64 | 72           |
| 32 | 17569080     | 72 | 2            |

A partir de la tabla anterior (almacenada en el archivo de texto `data_dos_L6.txt`) y con ayuda del código VI. (desarrollado por W.Krauth et.al. ver también [15] p.236) se puede calcular y graficar el calor específico en función de la temperatura. A continuación se muestra el pseudocódigo que sintetiza dicho proceso:

```

procedimiento  cv_enumeración
introducir data_dos_L6.txt   $\mathcal{D}(E)$ 
 $T \leftarrow \{0.5 + 0.5 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 9\}$ 
 $C \leftarrow \{\}$ 
para  $t \in T$  hacer
     $c \leftarrow \frac{1}{36T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ 
     $C \leftarrow C \cup \{c\}$ 
entregar  $C$ 

```

El gráfico del comportamiento del calor específico en función de la temperatura, obtenido con el algoritmo previo, es el siguiente:

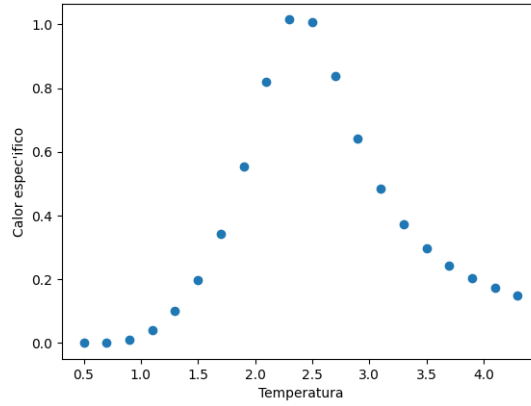


Figura XXIV:  $c_v$  vs. temperatura,  $T_c \in [2, 2.5]$ .

Es importante recalcar que esta técnica es la más sencilla y natural pero tiene la desventaja de ser práctica sólo para rejillas pequeñas, ya que la cantidad de operaciones realizadas crece exponencialmente con las dimensiones de estas. Pero las rejillas pequeñas periódicas resultan ser modelos muy restringidos de los ferromagnetos macroscópicos que se busca estudiar, por lo que son necesarias redes de mayor tamaño.

## B. Algoritmos de Monte Carlo.

Debido a las limitaciones del enfoque anterior, es necesaria una nueva aproximación al problema, y una forma es usando el método de Montecarlo, que considera una muestra estadística del conjunto de configuraciones. Cada configuración  $\Phi$  tiene un peso estadístico dado por la distribución de Boltzmann

$$\frac{1}{Z} \exp(-\beta E(\Phi)),$$

donde  $\beta$  es la inversa de la temperatura,  $E(\Phi)$  es la energía de la configuración en cuestión y  $Z$  es un factor normalizador. Dado un observable  $O$ , su valor esperado vendría dado por

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int O(\Phi) \exp(-\beta E(\Phi)) d\Phi.$$

Volviendo a la colección aleatoria de configuraciones  $\Phi_1, \dots, \Phi_N$ , donde el observable toma los valores  $O(1), \dots, O(N)$ , bajo apropiadas hipótesis se espera la siguiente convergencia

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(i) \rightarrow_N \langle O \rangle, \quad (\text{III.2})$$

de manera que la muestra estadística permita una aproximación a la media de  $O$ .

**Algoritmos de muestreo directo.** Como primer ensayo se pueden elegir las configuraciones de manera independiente, de forma que gracias a la ley débil de grandes números se verifica III.2. Si bien este método es sencillo, resulta inaplicable en casos donde hay muchas restricciones y por consiguiente para obtener una configuración aceptable se requiere un gran costo computacional (ver [15] p.97). Tampoco es útil cuando el objeto de estudio tiene una cierta tendencia, como por ejemplo un sistema de espines que a baja temperatura tiene propensión a tenerlos alineados.

**Algoritmos Markovianos o de Monte Carlo.** Un enfoque más elaborado consiste en usar una cadena de Markov que permita obtener una configuración de otra precedente

$$\Phi_1 \rightarrow \Phi_2 \rightarrow \dots \rightarrow \Phi_N,$$

de manera que si el proceso es *irreducible o ergódico*, es decir si existe una probabilidad positiva de llegar en un número finito de pasos de cualquier estado a otro, entonces por el teorema ergódico se verifica III.2, de hecho las distribuciones de las variables aleatorias  $\Phi_i$  convergen a una distribución  $\pi$ , denominada *estacionaria* (ver [19] p.41 y 53). Una desventaja de este método es que las configuraciones sucesivas están correlacionadas, y por ello la convergencia puede ser lenta. Una forma de cuantificar esta correlación en un sistema de espines es mediante la *función de autocorrelación*

$$C(t) := \frac{\sum_{i=1}^{N-t} g(i)g(i+t)}{(N-t)\langle g^2 \rangle},$$

donde se han realizado  $N$  mediciones de la magnetización  $M$  y  $g_i := |M_i| - \langle |M| \rangle$   $i \leq N$ . En muchos casos la función  $C$  tiene un decaimiento exponencial

$$C(t) \sim \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right),$$

donde  $\tau$  es el *tiempo de autocorrelación* y depende de la cadena de Markov seleccionada, siendo los valores pequeños los más favorables. De forma recíproca, el *tiempo de autocorrelación (integrado)* se puede estimar mediante la siguiente ecuación:

$$\tau_{int} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} C(t). \quad (\text{III.3})$$

Otro aspecto de suma importancia es que las cadenas de Markov irreducibles usadas deben satisfacer la **condición de balance detallada**. Esta condición tiene profundos fundamentos matemáticos como el hecho de que un proceso es Markoviano si y sólo si el pasado y el futuro son independientes condicionando en el presente, por lo que

$$\Phi_N \rightarrow \Phi_{N-1} \rightarrow \dots \rightarrow \Phi_1$$

también es una cadena de Markov. Por otro lado también hay principios físicos como el equilibrio termodinámico, asociado a la distribución estacionaria de microestados  $\pi$ , que acarrearán la siguiente definición: Un proceso Markoviano irreducible, con matriz de transición  $(p_{ij})$  y distribución estacionaria  $\pi$ , verifica la condición de balance detallada si

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}. \quad (\text{III.4})$$

## 1. Método de muestra local.

Este es el procedimiento Markoviano más simple y la idea detrás es la siguiente: Dada una rejilla cuadrada con una configuración de espines  $\sigma$  con energía  $E_\sigma$ , se elige al azar un nodo y se intenta cambiar su orientación, acción que produciría una nueva configuración  $\sigma'$  con energía  $E_{\sigma'}$ . Esto implicaría un cambio de energía  $\Delta = E_{\sigma'} - E_\sigma$ , por lo cual, se acepta el cambio con probabilidad  $\min\{1, \exp^{-\beta\Delta}\}$ , o de manera sintetizada:

$$\begin{aligned} \sigma &\rightarrow \sigma' \quad \text{con probabilidad } \min\{1, \exp^{-\beta\Delta}\} \\ \sigma &\rightarrow \sigma \quad \text{con probabilidad } 1 - \min\{1, \exp^{-\beta\Delta}\}. \end{aligned}$$

Este procedimiento define una cadena de Markov irreducible, que verifica la condición de balance detallada y así también es ergódica. Al iterar  $n$  veces este proceso se obtiene una sucesión de configuraciones  $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$  con sus respectivas energías  $E_1, E_2, \dots, E_n$ , con las cuales se puede obtener su energía media y energía cuadrática media

$$\begin{aligned} \langle \bar{E} \rangle &= \frac{E_1 + E_2 + \dots + E_n}{n}, \\ \langle \bar{E}^2 \rangle &= \frac{E_1^2 + E_2^2 + \dots + E_n^2}{n}, \end{aligned}$$

de manera que  $\frac{\beta^2}{N}(\langle \bar{E}^2 \rangle - \langle \bar{E} \rangle^2)$  se aproxima al valor del calor específico provisto por la ecuación III.1.

Respecto a este método, es pertinente hacer dos observaciones:

1. La primera concierne a la configuración de partida  $\sigma$ , debido a que si ésta es aleatoria es factible que tenga muchos espines antiparalelos, lo que conlleva a que a temperaturas muy bajas, la tasa de aceptación pueda ser muy pequeña y por lo tanto dicha configuración se repita una y otra vez, lo cual entra en conflicto con el hecho de que a esas temperaturas las disposiciones de espines tienden a estar alineadas, por lo cual se decide partir de una configuración donde todos los espines están alineados.
2. La segunda es que el método de muestra local es adecuado para temperaturas alejadas de la temperatura crítica  $T_c = 2.269$  (ver el modelo de Ising en dimensión  $d=2$ ), pero mientras más cerca se está de dicho valor el cómputo se vuelve más y más lento. Esto se explica de forma resumida debido a que cerca a dicha temperatura la magnetización total tiene una distribución amplia, es decir el conjunto de valores que puede asumir es extenso, del orden del número de nodos de la rejilla, mientras que el algoritmo sólo permite cambios sucesivos  $\pm 2$  en la magnetización. Este fenómeno también se puede explicar en el hecho de que las sucesivas configuraciones están fuertemente correlacionadas, por lo que convergencia es lenta.

Con las consideraciones previas y del hecho que dada una configuración  $\sigma$  se puede obtener su energía  $E(\sigma)$ , se presenta el siguiente pseudocódigo que describe el algoritmo señalado:

```

procedimiento muestra_local
introducir colección  $\mathcal{N}$  de vecinos inmediatos
 $T \leftarrow \{0.5 + 0.5 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 9\}$ 
 $I \leftarrow 10000$ 
 $C \leftarrow \{\}$ 
para  $t \in T$  hacer
     $\mathcal{E} \leftarrow \{\}$ 
     $\mathcal{S} \leftarrow [1 \text{ para } 1 \leq j \leq L^2]$ 
    para  $i \in I$  hacer
         $k \leftarrow \text{aleatorio en } \{1, 2, \dots, L^2\}$ 
         $\delta \leftarrow 2\mathcal{S}[k] \times \sum_{\mathcal{N}[k]} \mathcal{S}[j]$ 

        si aleatorio en  $[0, 1] < \exp(-\frac{\delta}{T})$  entonces
             $\mathcal{S}[k] \leftarrow -1 \times \mathcal{S}[k]$ 
             $\mathcal{E} \leftarrow \mathcal{E} \cup \{\text{energía}(\mathcal{S})\}$ 

     $c \leftarrow \text{varianza de } \mathcal{E}$ 
 $C \leftarrow C \cup \{c\}$ 
entregar  $C$ 

```

El código manifiesto se encuentra en el Apéndice (ver VI.). Se obtiene la siguiente gráfica del calor específico en función de la temperatura:

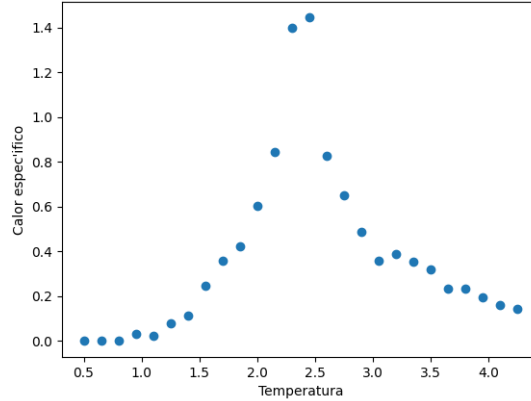


Figura XXV:  $c_v$  vs. temperatura.

## 2. Método clúster de Swendsen y Wang.

Basándose en la exposición anterior es evidente que para evitar la ralentización computacional en inmediaciones de la temperatura crítica se deben tener variaciones grandes de la magnetización entre iteraciones sucesivas, por consiguiente configuraciones débilmente correlacionadas, y una forma de conseguirlo es intentando invertir el signo de conjuntos o clústeres de espines, siempre satisfaciendo la condición de balance detallado para obtener las distribuciones adecuadas.

**Fundamento matemático.** Uno de los primeros trabajos bajo esta perspectiva la desarrollaron Swendsen y Wang, cuyo modelo está basado en la teoría matemática desarrollada por Fortuin y Kasteleyn (ver [9]p.4-10 o el Apéndice.) El planteamiento considera una rejilla cuadrada  $\mathcal{S} = \{(i, j) : 1 \leq i, j \leq L\}$  y aristas  $\mathcal{A} = \{< x, y > : x, y \in \mathcal{S}; \|x - y\| = 1\}$  con bordes periódicos, igual al presentado para el modelo de Ising en el segundo capítulo; además en cada nodo hay un espín con valores en  $\{0, 1\}$ , por lo cual se tienen configuraciones  $\sigma \in \{0, 1\}^{\mathcal{S}}$  de espines. De forma simultánea se abordan configuraciones  $\eta$  de aristas, de manera que se denota  $\eta_{xy} = \eta_{<xy>} = 1$  si la arista  $< x, y >$  está conectada (cerrada) y  $\eta_{xy} = \eta_{<xy>} = 0$  si está desconectada (abierta). Entonces se define la probabilidad conjunta:

$$P(\sigma, \eta) = Z^{-1} \prod_{<x,y>} [(1 - p_{x,y})\delta_{\eta_{xy},0} + p_{x,y}\delta_{\sigma_x,\sigma_y}\delta_{\eta_{xy},1}],$$

donde  $Z = \sum_{\sigma} \sum_{\eta} \prod_{<x,y>} [(1 - p_{x,y})\delta_{\eta_{xy},0} + p_{x,y}\delta_{\sigma_x,\sigma_y}\delta_{\eta_{xy},1}]$ ,  $J_{x,y}$  es la constante de intercambio y tiene implícita la temperatura,  $p_{x,y} = 1 - \exp(-J_{x,y})$  y  $\delta_{(\cdot)}$  es la función delta de Kronecker. El trasfondo de la probabilidad anterior es que si dos nodos adyacentes  $x, y$  tienen igual valor, entonces la arista  $< x, y >$  está cerrada con probabilidad  $p_{xy}$ , pero si tienen valores diferentes entonces  $< x, y >$  está siempre abierta (ver el teorema ..2).

De lo anterior, sumando sobre todas las configuraciones de aristas, se obtiene que la probabilidad de una configuración  $\sigma$  es igual a

$$\begin{aligned} P\sigma &= \sum_{\eta} P(\sigma, \eta) = Z^{-1} \exp\left(- \sum_{<x,y>} J_{xy}(1 - \delta_{\sigma_x,\sigma_y})\right) \\ &= Z^{-1} \exp(-H(\sigma)), \end{aligned} \quad (\text{III..5})$$

donde  $H(\sigma) = \sum_{<x,y>} J_{xy}(1 - \delta_{\sigma_x,\sigma_y})$  es el Hamiltoniano del modelo de Potts.

Para obtener una expresión similar para las configuraciones de aristas se introduce preliminarmente el concepto de un *clúster geométrico* como un colectivo de espines adyacentes con igual valor, pero más fundamental es la siguiente noción:

**Definición B..1.** *Un clúster físico o simplemente **clúster**, es una colección de sitios con espines orientados en la misma dirección y conectados por una arista (cerrada); adicionalmente debe ser maximal en el sentido que no está incluido propiamente en otro clúster.*

Entonces de forma semejante se obtiene

$$P\eta = \sum_{\sigma} P(\sigma, \eta) = Z^{-1} \prod_{<x,y>,\eta_{xy}=1} p_{xy} \prod_{<x,y>,\eta_{ij}=0} (1 - p_{xy})2^{c(\eta)}, \quad (\text{III..6})$$

con  $c(\eta)$  el número de clústeres de la configuración  $\eta$ , observándose que el cardinal de un clúster está comprendido entre 1 y  $L^2$ .

Las probabilidades condicionales

$$P(\sigma|\eta) = \frac{P(\sigma, \eta)}{P\eta}, \quad P(\eta|\sigma) = \frac{P(\sigma, \eta)}{P\sigma},$$

verifican la condición de microreversibilidad

$$P\sigma P(\eta|\sigma) = P\eta P(\sigma|\eta),$$

y gracias a las ecuaciones III.5 y III.6 se obtiene que la probabilidad de obtener la configuración de espines  $\sigma$  dada la configuración de aristas  $\eta$  es

$$P(\sigma|\eta) = 2^{-c(\eta)} \prod_{\langle x,y \rangle, \eta_{xy}=1} \delta_{\sigma_x, \sigma_y}.$$

Por otra parte la probabilidad de alcanzar la configuración  $\eta$  dada  $\sigma$  es

$$P(\eta|\sigma) = \prod_{\langle x,y \rangle, \sigma_x = \sigma_y} [(1 - p_{xy})\delta_{\eta_{xy},0} + p_{xy}\delta_{\eta_{xy},1}] \prod_{\langle x,y \rangle, \sigma_x \neq \sigma_y} \delta_{\eta_{xy},0}.$$

Si se define el operador  $T$  como

$$T(\sigma', \sigma) = \sum_{\eta} P(\sigma'|\eta)P(\eta|\sigma),$$

entonces se establece el *algoritmo de Swendsen-Wang* como la aplicación iterativa del operador  $T$ , cuya acción consiste en partir de una configuración de espines  $\sigma$ , construir clústeres compatibles con aquella e invertir con probabilidad  $\frac{1}{2}$  la orientación de dichos clústeres de forma independientemente, obteniendo  $\sigma'$ . Debido a propiedades básicas de probabilidad se tiene

$$P\sigma' = \sum_{\sigma} T(\sigma', \sigma)P\sigma, \quad (\text{III.7})$$

de lo cual se deduce que dicho algoritmo es una cadena de Markov. Es evidente que el proceso es ergódico, además también satisface la condición de balance detallada III.4

$$P(\sigma)T(\sigma', \sigma) = P(\sigma')T(\sigma, \sigma').$$

En este punto es apropiado comparar el algoritmo de muestra local con el de Swendsen y Wang en lo concerniente a cuan rápido se converge a los valores medios de los observables (ecuación III.2) cerca a la temperatura crítica, con ese objetivo se muestra la siguiente gráfica donde se compara el número de espines  $L$  por lado de la rejilla cuadrada con el tiempo de autocorrelación integrado  $\tau_{int}$ .

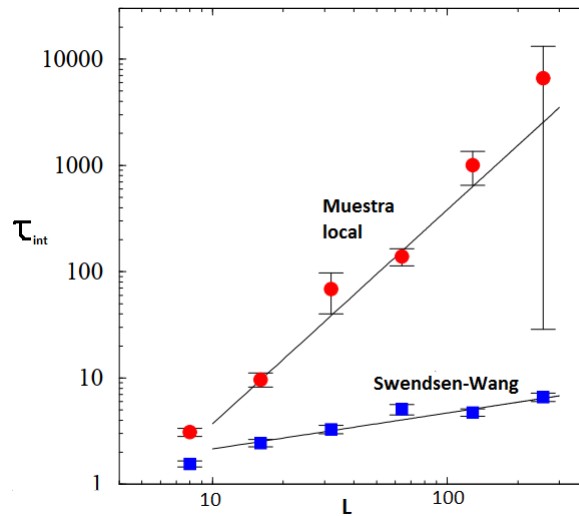


Figura XXVI:  $\tau_{int}$  para diversos valores de  $L$ , cuanto  $T = T_C$ . Adaptado de [24].

Como se aprecia en la figura precedente el algoritmo de Swendsen y Wang tiene tiempos de autocorrelación significativamente menores que el de muestra local, por lo cual las simulaciones son más rápidas.

**Magnitudes físicas y percolativas.** El enfoque de clústeres genera familias de espines alineados conectados por aristas cerradas, algunas de las cuales pueden ser tan grandes como la rejilla misma. Para ilustrar esto se muestra una rejilla de  $64 \times 64$  espines, donde un espín con valor 0 se representa como un pequeño cuadrado blanco y uno con valor 1 se muestra de color negro.

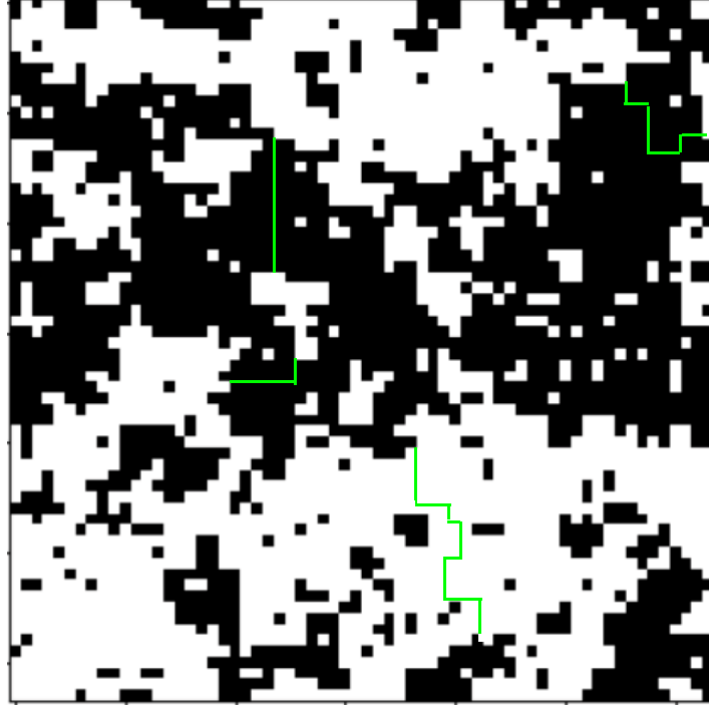


Figura XXVII: Clústeres en una rejilla cuadrada. Las fronteras en verde separan clústeres dentro de un mismo clúster geométrico.

Se aprecian clústeres con ambos valores, algunos de un sólo espín, otros más grandes y unos cuantos con un cardinal del orden de  $64^2$ . Un clúster es descrito por dos magnitudes: la primera, denotada  $m_{cl}$ , es igual a la suma de los valores de sus espines y la segunda,  $u_{cl}$ , está asociada a la energía y es igual al número de aristas del cluster, dividido por  $p = 1 - \exp(-\frac{J}{kT})$  con  $T$  la temperatura. Como cada sitio pertenece a algún clúster, si  $p(m_{cl}, u_{cl})$  es el número de clústeres (por sitio) con magnetización  $m_{cl}$  y  $pu_{cl}$  aristas, entonces

$$\sum_{m_{cl}} \sum_{u_{cl}} |m_{cl}| p(m_{cl}, u_{cl}) = 1.$$

El modelo de Potts, cuyos espines toman valores en  $\{0, 1\}$  es equivalente al modelo de Ising, como queda patente al comparar sus Hamiltonianos (ver III.5). En efecto basta multiplicar los espines del primero por 2 y después restar 1 para obtener los del segundo, por lo cual se puede trabajar con el Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle x, y \rangle \in \mathcal{A}} \sigma_x \sigma_y.$$

Sean las variables aleatorias  $N_{\parallel} = \#\{\langle x, y \rangle : \sigma_x = \sigma_y\}$  y  $N_b = \#\{\langle x, y \rangle : \langle x, y \rangle \text{ está cerrado}\}$ , donde claramente  $N_b \leq N_{\parallel}$  y se cumple

$$\langle N_b \rangle = p \langle N_{\parallel} \rangle \quad \text{y} \quad \langle N_b^2 \rangle = p^2 \langle N_{\parallel}^2 \rangle + pq \langle N_{\parallel} \rangle.$$

De Meo et.al. desarrollan algunos cálculos para estudiar observables (ver [7] p.595-598), que se muestran a continuación. La energía media,  $\langle H \rangle$ , verifica las relaciones

$$\frac{\langle H \rangle}{L^2} = -2J \left( \frac{N_b}{pL^2} - 1 \right) = -2J \left( \sum_{u_{cl}} u_{cl} \langle p(u_{cl}) \rangle - 1 \right),$$

donde  $p(u_{cl}) = \sum_{m_{cl}} p(m_{cl}, u_{cl})$ . De forma paralela el calor específico  $c_v$  satisface

$$\begin{aligned} c_v L^2 &= \frac{4J^2}{kT^2} \left( \langle N_{\parallel}^2 \rangle - \langle N_{\parallel} \rangle^2 \right) \\ &= \frac{4J^2}{kT^2 p^2} \left( \langle N_b^2 \rangle - \langle N_b \rangle^2 - (1-p) \langle N_b \rangle \right). \end{aligned}$$

La magnetización por nodo  $M$  cumple

$$M = \frac{1}{L^2} \sum_x \sigma_x = \sum_{m_{cl}} m_{cl} p(m_{cl}),$$

además existe un clúster (*cluster infinito*) con la magnetización absoluta máxima  $|m_{\infty}|$ , con la aclaración de que si existen dos o más de ellos, se elige uno de forma arbitraria entre los que tiene igual signo que  $M$ . Si se aísla este clúster se tiene la siguiente equivalencia

$$p(m_{cl}) = p'(m_{cl}) + \delta_{m_{cl}, m_{\infty}},$$

donde en  $p'$  se ha extraído el clúster infinito. Con los instrumentos previos se tiene

$$\langle |M| \rangle = \frac{1}{L^2} \langle \left| \sum_x \sigma_x \right| \rangle = \langle \left| \frac{m_{\infty}}{L^2} + \sum_{m_{cl}} m_{cl} p'(m_{cl}) \right| \rangle,$$

y se define la *probabilidad de percolación*

$$\langle P_{\infty} \rangle = \langle \left| \frac{m_{\infty}}{L^2} \right| \rangle.$$

En sistemas suficientemente grandes las magnitudes  $\langle |M| \rangle$  y  $\langle P_{\infty} \rangle$  se aproximan entre sí, hasta coincidir en el límite termodinámico, por lo que es de utilidad comparar algunos observables asociados a ellas.

**Definición B..2.** Se define la susceptibilidad magnética de un sistema de Ising como

$$\chi = \frac{L^2}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2),$$

y la susceptibilidad percolativa como

$$\chi_p = \sum_{m_{cl}} m_{cl}^2 \langle p'(m_{cl}) \rangle.$$

Fundamentado en que las magnetizaciones en clústeres diferentes no están correlacionadas, se pueden comparar las magnitudes recién definidas.

$$\begin{aligned} T\chi &= L^2 \left( \frac{1}{L^4} \langle \sum_{x,y \text{ dif. clus.}} \sigma_x \sigma_y \rangle - \langle |M| \rangle^2 \right) \\ &= L^2 \left( \frac{1}{L^2} \sum_{m_{cl}} m_{cl}^2 \langle p(m_{cl}) \rangle - \langle |M| \rangle^2 \right) \\ &= \sum_{m_{cl}} m_{cl}^2 \langle p'(m_{cl}) \rangle + L^2 (\langle P_{\infty}^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2) \\ &= \chi_p + L^2 (\langle P_{\infty}^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2), \end{aligned}$$

y debido a que en sistemas suficientemente grandes  $\langle |M| \rangle \approx \langle P_\infty \rangle$ , se deduce la aproximación

$$T\chi \approx \chi_p + L^2(\langle P_\infty^2 \rangle - \langle P_\infty \rangle^2),$$

lo que muestra que la susceptibilidad magnética es la suma de la contribución de los clústeres menores, más el aporte debido a una fluctuación en el tamaño del cluster infinito.

Para concluir la subsección se muestran algunas gráficas del artículo [7], que describen el comportamiento del calor específico y la susceptibilidad magnética, usando el algoritmo de Swendsen-Wang.

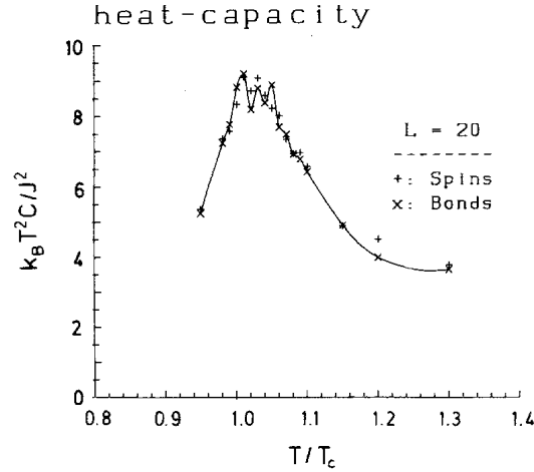


Figura XXVIII: Calor específico vs. Temperatura [7].

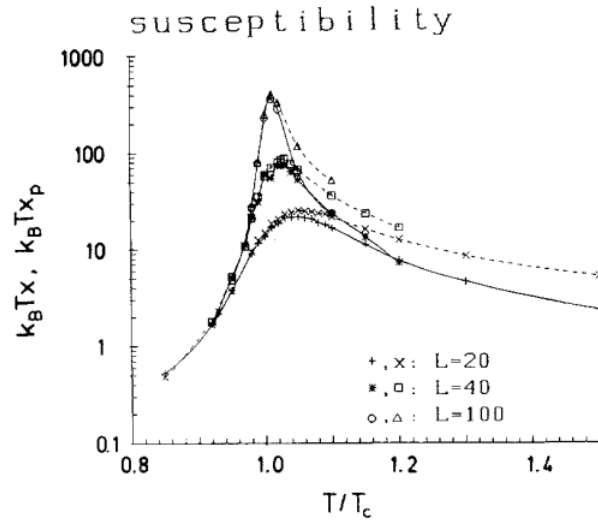


Figura XXIX: Susceptibilidad vs. Temperatura, para rejillas con  $L$  espines por lado [7].

### 3. Método clúster de Wolff.

El método de Wolff es simultaneamente una mejora y una generalización del método de Swendsen y Wang, en el sentido de que en una transición ya no se invierten todos los clústeres, sino sólo uno, y por otro lado los espines pueden tomar valores vectoriales (ver [25]). Más precisamente, los espines están ubicados en una rejilla bidimensional o tridimensional, y dado

$n \geq 1$ , toman valores en el conjunto de los vectores unitarios en  $\mathbb{R}^n$ . En el presente trabajo se exploran las ventajas de invertir un único clúster, mientras que se considera  $n = 1$ , es decir los espines toman valores  $\pm 1$ .

Sea  $(\mathcal{S}, \mathcal{A})$  una rejilla bidimensional como en el modelo de Ising, o tridimensional; además en cada nodo  $x \in \mathcal{S}$  existe una partícula con espín  $\sigma_x$ . El presente algoritmo puede ser descrito de la siguiente manera:

1. Se elije aleatoriamente un nodo  $x$  de la rejilla, que será denominado el precursor. Se define el conjunto llamado *bolsa* igual a  $\{x\}$ .
2. Se exploran todos sus vecinos inmediatos  $y$ , y con aquellos que verifican  $\sigma_x = \sigma_y$  se crea una conexión de forma independiente con probabilidad  $1 - \exp(-2J)$ . La nueva bolsa está conformada por todos los espines conectados, excepto  $x$ .
3. Se elije aleatoriamente un elemento  $z$  de la bolsa, se identifican sus vecinos inmediatos y con aquellos alineados a él pero no previamente conectados se crea una conexión con probabilidad  $1 - \exp(-2J)$ . La nueva bolsa adiciona los nuevos espines conectados y descarta a  $z$ .
4. Se repite el proceso hasta que la bolsa queda vacía. El clúster será el conjunto de todos los espines conectados, finalmente se invierte el signo de todos ellos.

El procedimiento descrito es una cadena de Markov, porque su comportamiento futuro es independiente del pasado dado el presente, además es ergódico, en el sentido de que partiendo de cualquier configuración existe una probabilidad positiva de llegar a cualquier otro en un número finito de pasos. También se verifica la condición de balance detallada: Dada una configuración  $\sigma$ , si se aplica el algoritmo mostrado entonces se invierte un cluster  $\mathcal{C}$  obteniéndose una configuración  $\sigma'$ . Se define la frontera del cluster,  $\partial\mathcal{C}$ , como la colección de aristas en  $\{< x, y > \in \mathcal{A} : x \in \mathcal{C}, y \notin \mathcal{C}\}$ , o equivalentemente,  $\partial\mathcal{C}$  se compone de segmentos perpendiculares a estas aristas, de forma análoga a las paredes en la introducción del modelo de Ising. Sean

$$\begin{aligned} n_1 &= \#\{< x, y > \in \partial\mathcal{C} : \sigma_x \neq \sigma_y\}, \\ n_2 &= \#\{< x, y > \in \partial\mathcal{C} : \sigma_x = \sigma_y\}, \end{aligned}$$

entonces existen  $n_2$  espines fuera del clúster pero adyacentes a algunos de sus espines, además son paralelos a estos, pero no fueron considerados por el algoritmo al construir  $\mathcal{C}$ . De forma recíproca, si se parte de  $\sigma'$  todos los espines de  $\mathcal{C}$  están invertidos, por lo que existen  $n_1$  espines ajenos al clúster pero adyacentes a él y con igual orientación a este, por lo que no fueron tomados en cuenta al construir  $\mathcal{C}$ , por lo anterior se deduce la importante relación

$$\frac{P(\sigma \rightarrow \sigma')}{P(\sigma' \rightarrow \sigma)} = \frac{(1-p)^{n_2}}{(1-p)^{n_1}} = \frac{\exp(-\beta(n_2 - n_1))}{\exp(-\beta(n_1 - n_2))},$$

donde  $P(\sigma \rightarrow \sigma')$  es la probabilidad de pasar de  $\sigma$  a  $\sigma'$ , y de forma similar  $P(\sigma' \rightarrow \sigma)$ . La elección particular de  $p = 1 - \exp(-2\beta)$  simplifica enormemente los cálculos.

En la siguiente gráfica se compararan los tiempos de autocorrelación de los algoritmos de Wolff y de Swendsen-Wang, en función del número de espines por lado  $L$ .

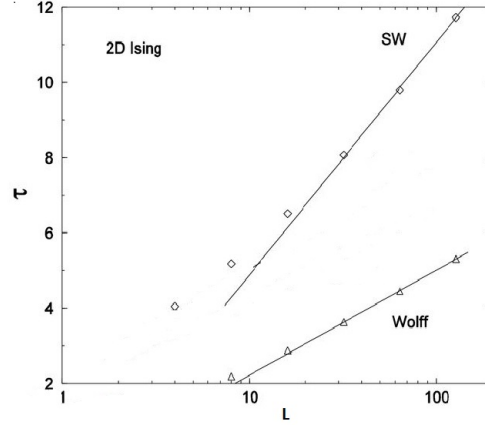


Figura XXX:  $\tau$  vs  $L$ . Adaptado de [24].

Es evidente que el algoritmo de Wolff tiene tiempos de autocorrelación menores a los de Swendsen-Wang, por lo cual la convergencia de sus estimaciones será más rápida.

Fundamentándose en el hecho de que el clúster puede ser construido a partir de cualquiera de sus nodos, entonces si  $\{\mathcal{C}_{sw}\}$  denota la colección de todos los clústeres de Swendsen y Wang (uno de los cuales es el clúster de Wolff  $\mathcal{C}$ ), entonces

$$\langle |\mathcal{C}| \rangle = \frac{1}{L^2} \langle \sum_{\{\mathcal{C}_{sw}\}} |\mathcal{C}_{sw}|^2 \rangle,$$

y cerca a la temperatura crítica se verifica la importante relación

$$\chi = \frac{1}{L^2} \langle (\sum_x \sigma_x)^2 \rangle = \langle |\mathcal{C}| \rangle.$$

## IV. Aplicaciones de los algoritmos tipo clúster.

En el capítulo precedente se introduce el modelo de Swendsen y Wang, así como el de Wolff, debido a que se usarán dichos algoritmos para estudiar sistemas de Ising en redes tridimensionales, específicamente en redes cúbicas simples y cúbicas centradas en el cuerpo. El arquetipo de Wolff simplifica notablemente el costo computacional respecto al de Swendsen y Wang, debido a que se construye un único cluster, pero el segundo tiene un mayor valor si se busca relacionar las propiedades físicas, como la susceptibilidad magnética, con las características matemáticas como la percolación de clústeres.

### A. Implementación de los códigos.

En seguida se describen los diversos códigos del algoritmo de Wolff así como el de Swendsen y Wang, para redes bidimensionales y tridimensionales, todos escritos en Python. Los códigos manifiestos se encuentran en el Apéndice.

#### 1. Algoritmo de Wolff en una red de dimensión $d=2$ .

Los sistemas de Ising en dos dimensiones, en especial aquellos con rejillas cuadradas, han sido ampliamente estudiados y simulados, por ejemplo Steinber et.al ([23]) hacen estimaciones usando el algoritmo local de Monte Carlo, y Demeo et.al([7]) hacen lo propio haciendo uso del algoritmo de Swendsen y Wang.

Con el propósito de examinar el desempeño del algoritmo de Wolff, se implementa un algoritmo en Python para estimar el calor específico y la susceptibilidad magnética de una rejilla cuadrada periódica con  $L \times L$  espines, usando el modelo de Ising. Las líneas del código se han dividido en cuatro grupos para su mejor comprensión, y se describen a continuación. El código explícito se puede encontrar en el Apéndice (ver VI.) y está basado en el trabajo de W. Krauth et.al. (ver 15 p.254-258).

En seguida se muestra una caracterización de las cuatro partes del algoritmo.

■ El paso inicial muestra:

- Las librerías usadas, como numpy, matplotlib, etc.
- La rejilla cuadrada periódica, con el artificio *nbr* que permite construir la estructura de 4 vecinos por cada nodo.
- La constante de intercambio  $e$ , el campo magnético, una lista de temperaturas, el número de iteraciones y la configuración inicial  $S$ .

■ La segunda parte muestra:

- La función que calcula la energía, en función de la configuración y los vecinos de cada nodo.

- La función que define la magnetización, en función de la configuración.
  - La función que permite construir los clústeres a partir de una configuración.
- La tercera parte codifica lo siguiente:
- Para cada temperatura solicitada, calcula la energía y la magnetización de un colectivo estadístico de configuraciones, y crea una lista con estas.
  - El calor específico y la susceptibilidad se estiman midiendo las fluctuaciones en dichas listas
- El último fragmento sirve para:
- Almacenar los valores calculados del calor específico y la susceptibilidad en función de la temperatura.
  - Graficar el comportamiento de calor específico y la susceptibilidad como funciones de la temperatura.

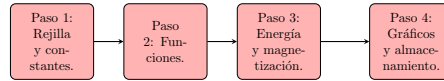


Figura XXXI: Las 4 partes consecutivas del algoritmo.

El fragmento modular del algoritmo previo se encuentra en la segunda parte, en específico en la función que permite construir los clústeres, es por ello que para esclarecer más el código se presenta el siguiente pseudocódigo:

```

procedimiento Wolff-Ising
introducir configuración de espines  $\sigma_1, \dots, \sigma_{L^2}$ 
 $j \leftarrow$  aleatorio en  $(1, L^2)$ 
 $\mathcal{C} \leftarrow \{j\}$ 
 $\mathcal{P} \leftarrow \{j\}$ 
mientras  $\mathcal{P} \neq \emptyset$  hacer
   $k \leftarrow$  aleatorio en  $\mathcal{P}$ 
  para ( $\forall l$  vecino de  $k$ ,  $\notin \mathcal{C}$  y  $\sigma_l = \sigma_k$ ) hacer
    si (aleatorio en  $]0, 1[ < p$ ) entonces
       $\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{C} \cup \{l\}$ 
       $\mathcal{P} \leftarrow \mathcal{P} \cup \{l\}$ 
     $\mathcal{P} \leftarrow \mathcal{P} \setminus \{k\}$ 
  para  $\forall k \in \mathcal{C}$  hacer
     $\sigma_k \leftarrow -\sigma_k$ 
entregar  $\sigma_1, \dots, \sigma_{L^2}$ 
  
```

Los ajustes de curvas en potencias y logaritmos se usarán en la siguiente sección, por tal motivo de forma preliminar se presentan sus respectivos pseudocódigos:

**procedimiento** ajuste con potencias  
**introducir** valores del observable  $O$  en función  
de la temperatura  $T$   
**para**  $\forall T$  **hacer**  
 $t \leftarrow T$   
**para**  $\forall (T, O)$  **hacer**  
ajuste potencial de curvas  
**entregar** gráfica  $O$  vs.  $t$ , exponentes críticos  
y coeficiente  $R^2$ .

**prodecimiento** ajuste logarítmico  
**introducir** valores del observable  $O$  en función  
de la temperatura  $T$   
**para**  $\forall T$  **hacer**  
 $t \leftarrow T$   
**para**  $\forall (T, O)$  **hacer**  
ajuste logarítmico de curvas  
**entregar** gráfica  $O$  vs.  $t$ , exponentes críticos  
y coeficiente  $R^2$ .

El coeficiente  $R^2$  mide cuan cercanos están los datos respecto a los valores provistos por la curva ajustada, mientras más próximo esté a 1 mejor es el ajuste. Los códigos se puede apreciar en el Apéndice (ver VI. y VI.).

## 2. Algoritmo de Wolff en una red tridimensional cúbica simple (SC).

Al igual que en el caso bidimensional, se implementa un algoritmo dividido en 4 segmentos, con la única diferencia de que el paso 1 debe crear un sistema de vecinos en una red cúbica periódica. En la imagen siguiente se muestra una porción de una red cúbica simple: La idea

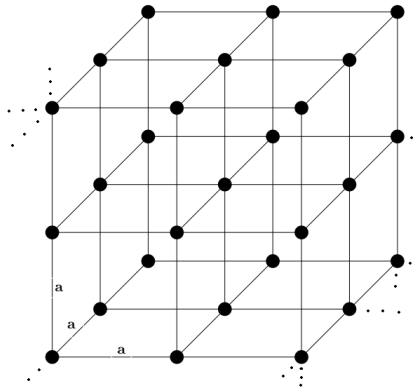


Figura XXXII: Fragmento de una red SC.

para crear la mencionada estructura de vecinos consiste en dividir la red en sucesivas capas paralelas al plano  $XY$ , empezando desde la superior y terminando en la inferior. Cada capa es a su vez dividida en columnas y filas. Este método permite etiquetar cada partícula e identificar a sus 6 vecinos inmediatos (ver el Apéndice VI.).

### 3. Algoritmo de Swendsen y Wang en una red cúbica simple (SC).

Debido a que el modelo de Wolff no es adecuado para el estudio de las propiedades geométricas de los clústeres, se implementa el algoritmo de Swendsen y Wang con Python (ver VI.), basado en el trabajo de Heusinkveld et. al. (ver [https://github.com/VHeusinkveld/Ising\\_Model-CP2/blob/master/Ising\\_simulation.py](https://github.com/VHeusinkveld/Ising_Model-CP2/blob/master/Ising_simulation.py)). En dicha publicación se hace un estudio estadístico pormenorizado del modelo de Ising bidimensional, pero el presente código prescinde de ese detalle y más bien se enfoca en extrapolar las ideas para simular el modelo de Ising tridimensional.

■ **Paso 1.** En primer lugar se inicializan( con el script `initialisation_3d.py` ) la rejilla tridimensional, la configuración de espines, los observables físicos, las magnitudes geométricas, etc. Con el fin de hacer más legible el código (ver VI.) se muestran los siguientes pseudocódigos:

Para empezar se elige una configuración inicial de espines.

```

procedimiento assign spin
si ( selecciona aleatorio ) entonces
     $\sigma_i = \text{aleatorio en } \{-1, 1\} \forall i \leq L^3$ 
si ( selecciona arriba ) entonces
     $\sigma_i = 1 \forall i \leq L^3$ 
si ( selecciona abajo ) entonces
     $\sigma_i = -1 \forall i \leq L^3$ 
entregar  $\sigma_i \forall i \leq L^3$ 

```

A continuación se ordenan todas las coordenadas de los espines.

```

procedimiento grid init
introducir  $L^3$  coordenadas  $\mathcal{C}$ 
 $\mathcal{C}_1 = \{\}$ 
 $\mathcal{C}_2 = \{\}$ 
 $\mathcal{C}_3 = \{\}$ 
para  $\forall (c = (c_1, c_2, c_3)) \in \mathcal{C}$  hacer
    para  $i \in \{1, 2, 3\}$  hacer
         $\mathcal{C}_i \leftarrow \mathcal{C}_i \cup \{c_i\}$ 
entregar  $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3$ 

```

■ **Paso 2.** El siguiente paso es definir la energía de las configuraciones de espines, lo cual se realiza con el script `energies_3d.py`:

Se inicia calculando la energía de la interacción de un espín con sus vecinos.

```

procedimiento spin site energy
introducir configuración de espines  $\sigma_1, \sigma_1, \dots, \sigma_L^3$ 
                y posición  $\vec{x}$ 

 $e_{\vec{x}} \leftarrow 0$ 
 $\mathcal{N} \leftarrow \{ \text{vecinos de } \vec{x} \}$ 
para  $i \in \mathcal{N}$  hacer
    hallar  $\sigma_{\vec{x}}$ 
    hallar  $\sigma_i$ 
     $e_{\vec{x}} \leftarrow e_{\vec{x}} + \sigma_{\vec{x}}\sigma_i$ 
entregar  $e_{\vec{x}}$ 

```

Posteriormente se calcula la energía del sistema de espines.

```

procedimiento system energy
introducir conjunto  $\mathcal{X}$  de todas las posiciones
                y sus energías  $\{e_{\vec{x}}\}$ 

 $E \leftarrow 0$ 
para  $i \in \mathcal{X}$  hacer
     $E \leftarrow E + e_{\vec{x}}$ 
entregar  $\frac{E}{2}$ 

```

■ **Paso 3.** A continuación se definen las funciones que calculan la susceptibilidad magnética, calor específico, magnetización, así como el tamaño y la varianza del mayor clúster. Esto se realiza en `quantities_3d.py`:

Los procedimientos son similares, por ello sólo se muestra cómo se calcula la susceptibilidad magnética.

```

procedimiento chi calculate
introducir conjunto  $\mathcal{M}$  de las magnetizaciones
                de N configuraciones

 $\chi \leftarrow \text{varianza de } \mathcal{M}$ 
entregar  $\chi$ 

```

■ **Paso 4.** Posteriormente se codifica el algoritmo de Swendsen y Wang mediante el script `swendsen_wang_3d.py`:

En primer lugar se construye el conjunto de aristas cerradas.

**procedimiento** bond eval  
**introducir** configuración de espines, parámetro  $\delta$   
 $\mathcal{C} \leftarrow \{\}$   
 $\mathcal{C}' \leftarrow \{ \text{colección de aristas } \langle i, j \rangle \text{ tal que } \sigma_i = \sigma_j \}$   
**para**  $a \in \mathcal{C}'$  **hacer**  
    **si** aleatorio binomial( $1, \delta$ ) = 0 **entonces**  
         $\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{C} \cup \{a\}$   
**entregar**  $\mathcal{C}$

Se prosigue construyendo un clúster en particular y se invierte aleatoriamente la orientación de sus espines.

**procedimiento** back track  
**introducir** posición  $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ , clúster  $\mathcal{L}$ , colección  $\mathcal{C}$  de aristas conectadas, configuración  $\mathcal{S}$  de espines y conjunto  $\mathcal{V}$  de sitios no visitados  
 $\alpha \leftarrow \text{aleatorio en } \{\pm 1\}$   
**si**  $\vec{x} \in \mathcal{V}$  **entonces**  
     $\mathcal{V} \leftarrow \mathcal{V} \setminus \{\vec{x}\}$   
     $\mathcal{L} \leftarrow \mathcal{L} \cup \{\vec{x}\}$   
**para**  $i \in \{1, 2, 3\}$  **hacer**  
    **si** arista  $\langle x_i, x_{i+1} \rangle \in \mathcal{C}$  **entonces**  
         $\mathcal{L} \leftarrow \mathcal{L} \cup \{(x_{i+1}, y_i, z_i)\}$   
    **si** arista  $\langle x_i, x_{i-1} \rangle \in \mathcal{C}$  **entonces**  
         $\mathcal{L} \leftarrow \mathcal{L} \cup \{(x_{i-1}, y_i, z_i)\}$   
**entregar**  $\mathcal{L}, \{\alpha \sigma_{\vec{x}} \mid \vec{x} \in \mathcal{L}\}$

Finalmente, haciendo uso de los dos algoritmos precedentes se obtienen todos los clústeres y se invierten sus direcciones aleatoria e independientemente.

**procedimiento** SW algorithm  
**introducir** configuración  $\mathcal{S}$  de espines y colección  $\mathcal{C}$  de aristas conectadas  
 $\mathcal{I} \leftarrow \{\}$   
 $\mathcal{F} \leftarrow \{\}$   
 $\mathcal{V} \leftarrow \{ \text{conjunto total de nodos} \}$   
**para**  $\vec{x} \in \{ \text{conjunto total de nodos} \}$  **hacer**  
    **si**  $\vec{x} \in \mathcal{V}$  **entonces**  
         $\mathcal{L} \leftarrow \{\}$   
         $\mathcal{L}, \mathcal{A} \leftarrow \text{back track}(\vec{x}, \mathcal{L}, \mathcal{C}, \mathcal{S}, \mathcal{V})$   
         $\mathcal{V} \leftarrow \mathcal{V} \setminus \mathcal{L}$   
         $\mathcal{I} \leftarrow \mathcal{I} \cup \{\mathcal{L}\}$   
         $\mathcal{F} \leftarrow \mathcal{F} \cup \{\mathcal{A}\}$   
**entregar**  $\mathcal{I}, \mathcal{F}$

■ **Paso 5.** El penúltimo paso se desarrolla en `isin_simulation_3d.py`, y básicamente se usan las funciones definidas en los anteriores scripts para calcular los valores de los diversos observables

■ **Paso 6.** Finalmente, mediante `sw_wang_finalscript_3d.py`, las constantes como las dimensiones de la red, la constante de intercambio, las temperaturas, etc, se introducen en el script anterior para obtener los diversos observables.

#### 4. Algoritmo de Wolff en una red cúbica centrada en el cuerpo (BCC).

El código del algoritmo de Wolff para una red cristalina BCC periódica es semejante al caso SC, diferenciándose principalmente en la construcción de la estructura tridimensional. En la siguiente imagen se muestra una única celda, pero no es complicado apreciar que la partícula en la posición  $(0, 0, 0)$  tiene 8 vecinos inmediatos (uno de los cuales se muestra en la posición  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ), así como 6 vecinos secundarios (se muestra uno en  $(1, 0, 0)$ ), 12 terciarios (uno en  $(1, 1, 0)$ ), etc.

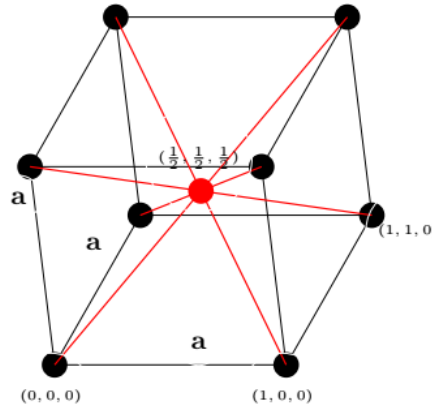


Figura XXXIII: Fragmento de una red BCC.

Se considera en particular un cristal BCC de hierro, cuyas constantes de intercambio se muestran en seguida:

| Fe (bcc)                              |       |                      | Co (fcc)                    |       |                      | Ni (fcc)                    |       |                      |
|---------------------------------------|-------|----------------------|-----------------------------|-------|----------------------|-----------------------------|-------|----------------------|
| $\mathbf{R}_{0j}$                     | $N_s$ | $J_{0j}[\text{mRy}]$ | $\mathbf{R}_{0j}$           | $N_s$ | $J_{0j}[\text{mRy}]$ | $\mathbf{R}_{0j}$           | $N_s$ | $J_{0j}[\text{mRy}]$ |
| $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ | 8     | 1.432                | $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ | 12    | 1.085                | $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ | 12    | 0.206                |
| (100)                                 | 6     | 0.815                | (100)                       | 6     | 0.110                | (100)                       | 6     | 0.006                |
| (110)                                 | 12    | -0.016               | $(1\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ | 24    | 0.116                | $(1\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ | 24    | 0.026                |
| $(\frac{3}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ | 24    | -0.126               | (110)                       | 12    | -0.090               | (110)                       | 12    | 0.012                |
| (111)                                 | 8     | -0.146               | $(\frac{3}{2}\frac{1}{2}0)$ | 24    | 0.026                | $(\frac{3}{2}\frac{1}{2}0)$ | 24    | 0.003                |
| (200)                                 | 6     | 0.062                | (111)                       | 8     | 0.043                | (111)                       | 8     | -0.003               |
| $(\frac{3}{2}\frac{3}{2}\frac{1}{2})$ | 24    | 0.001                | $(\frac{3}{2}1\frac{1}{2})$ | 48    | -0.024               | $(\frac{3}{2}1\frac{1}{2})$ | 48    | 0.007                |
| (210)                                 | 24    | 0.015                | (200)                       | 6     | 0.012                | (200)                       | 6     | -0.001               |
| (211)                                 | 24    | -0.032               | $(\frac{3}{2}\frac{3}{2}0)$ | 12    | 0.026                | $(\frac{3}{2}\frac{3}{2}0)$ | 12    | -0.011               |
| $(\frac{3}{2}\frac{3}{2}\frac{3}{2})$ | 8     | 0.187                | $(2\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ | 24    | 0.006                | $(2\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ | 24    | 0.001                |

Figura XXXIV: Constantes de intercambio del hierro BCC para las primeras 10 capas ([20] Tabla 1.)

En la tabla precedente se aprecia que la energía de intercambio de la partícula en  $(0, 0, 0)$  y cualquiera de sus vecinos inmediatos (*primera capa*) son iguales a  $3.1 \times 10^{-21}$  J. La energía

de intercambio entre la partícula en  $(0,0,0)$  y sus vecinos secundarios (*segunda capa*) son iguales a  $1.73 \times 10^{-21} \text{J}$ , mientras que las energías de intercambio de la partícula en  $(0,0,0)$  y los vecinos de la tercera, cuarta, etc capas son notablemente menores, aunque debido a que el número de estos es grande, por ejemplo en la cuarta capa hay 24 vecinos, su contribución no es del todo despreciable.

En primer lugar sólo se consideran las construcciones de la primera y segunda capas, de manera que la relación de las energías de intercambio de estas es de 1 a 0.56 (ver el código VI.). Posteriormente se incluye la contribución de las demás capas, con ese fin se hace la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned} \text{energía primera capa} &= N_1 \times J_1 \sim 11.5 \times 10^{-21} \text{J} \\ \text{energía otras capas} &= \sum_{j=2}^{10} N_j \times J_j \sim 2.3 \times 10^{-21} \text{J}, \end{aligned}$$

de manera que las energías de las otras capas (2,3,...,10) se consideran como energías de solo la segunda, lo cual implica cambiar las relación de las energías de intercambio de 1 a 0.2.

## B. Evaluación de los algoritmos.

Una vez presentados los códigos en la sección previa, se muestran a continuación los resultados obtenidos al ejecutarlos.

### 1. Algoritmo de Wolff en una red cuadrada bidimensional.

En primer lugar se ilustra el comportamiento del calor específico y la susceptibilidad magnética, para una rejilla con  $20 \times 20$  espines, en función de un amplio rango de temperaturas  $([0.5, 0.55, 0.6, \dots, 3.5])$  en la gráfica siguiente.

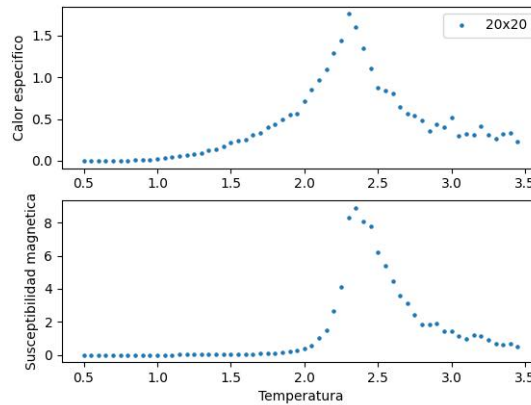


Figura XXXV: Calor específico y susceptibilidad magnética para un amplio rango de temperaturas.

Con el fin de obtener resultados más precisos se consideran dos rejillas cuadradas, la primera con  $30 \times 30$  espines y la segunda con  $50 \times 50$ . El modelo de Onsager, en el límite termodinámico, asegura que la temperatura crítica  $T_c$  es aproximadamente igual a 2.27, pero al trabajar con rejillas finitas es de esperar que dicho valor varíe en función de  $N = L \times L$ .

**Caso  $L=30$ .** En este caso, a partir de la gráfica debajo, se observa que el calor específico alcanza su máximo en la temperatura 2.30 mientras que la susceptibilidad magnética lo hace en 2.33, por lo cual se determina que  $T_c \sim 2.32$ , como se observa en la imagen inferior:

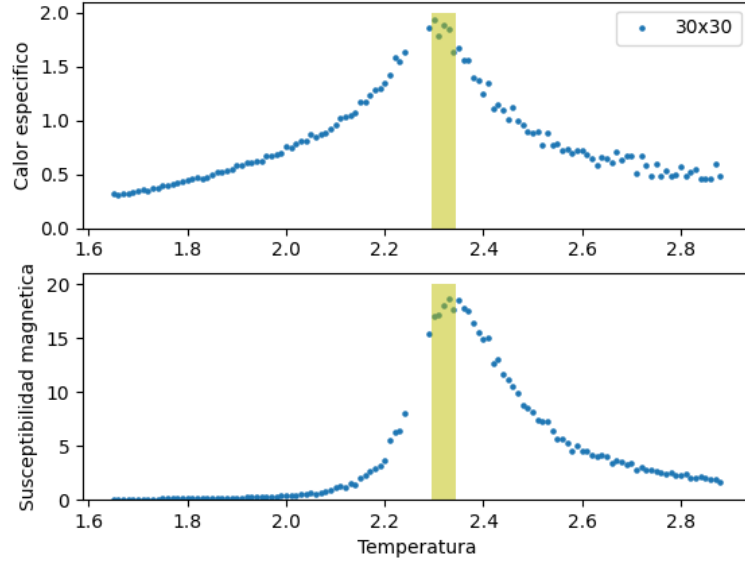


Figura XXXVI: La temperatura crítica pertenece a la intersección de la barra amarilla y el eje de temperaturas, por ello aproximadamente  $T_c = 2.32$ .

El intervalo de temperaturas (alrededor de  $T_c$ ) está incluido en  $[1.65, 2.88]$ , más precisamente es

$$T \in \{1.65 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 123\}$$

y con el fin de evitar las fluctuaciones muy cerca de la temperatura crítica se consideran dos subconjuntos

$$I_1 := \{1.65 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 59\} \quad \text{e} \\ I_2 := \{1.65 + 0.01 \times i \text{ para } 69 \leq i \leq 123\},$$

y por consiguiente en el paso 1 del algoritmo anterior se modifica el conjunto de temperaturas:

Para  $I_1$

```
T = [1.65+0.01*i for i in range(60)]
```

para  $I_2$

```
T = [2.34+0.01*i for i in range(60)]
```

y posteriormente para cada una de esas temperaturas  $T$  se define  $t = \frac{|T_c - T|}{T_c}$ .

Como se abordó en el primer capítulo, los exponentes críticos tienen una definición con la forma de una potencia, es decir una magnitud  $\mathcal{O}$  tiene un exponente crítico  $\theta$  si  $\mathcal{O} \sim t^\theta$ , razón por la cual en primer lugar se busca ajustar los datos obtenidos a una función de este tipo.

Las gráficas del ajuste anterior, para temperaturas cercanas a  $T_c$ , se muestran a continuación:

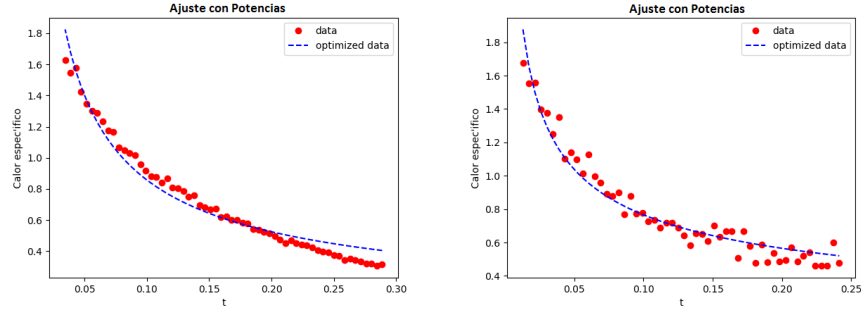


Figura XXXVII: El comportamiento del calor específico en función de  $t$ , a la izquierda para temperaturas en  $I_1$  y a la derecha para temperaturas en  $I_2$ .

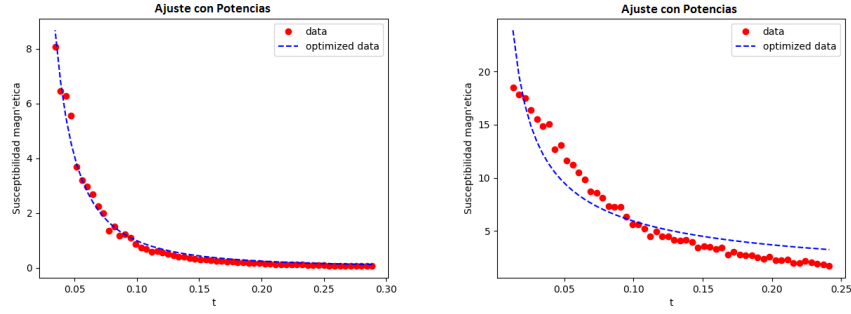


Figura XXXVIII: La susceptibilidad magnética en función de  $t$ , a la izquierda para temperaturas en  $I_1$  y a la derecha para temperaturas pertenecientes a  $I_2$ .

El ajuste de curvas permite obtener aproximaciones de los exponentes críticos  $\alpha$  (calor específico) y  $\gamma$  (susceptibilidad magnética), además el coeficiente  $R^2$  permite saber si el ajuste fue adecuado.

Tabla IV: Valores de parámetros asociados al calor específico y la susceptibilidad magnética.

| Parámetros | $\alpha$ | $R^2$  | Parámetros | $\gamma$ | $R^2$  |
|------------|----------|--------|------------|----------|--------|
| $I_1$      | 0.70     | 0.9661 | $I_1$      | 2.04     | 0.9834 |
| $I_2$      | 0.43     | 0.9512 | $I_2$      | 0.68     | 0.8901 |

En la tabla anterior se nota que el ajuste para el calor específico no es muy bueno, por lo que se debe intentar una aproximación de otro tipo, por otro lado los valores para susceptibilidad magnética son bastante buenos, por lo que la aproximación con curvas potencia es aceptable en este caso.

Como se anticipó previamente, el ajuste con potencias no es adecuada para el calor específico, razón por la cual se usa un ajuste del tipo logarítmico, cuyo pseudocódigo se muestra a continuación.

El código respectivo se puede encontrar en el Apéndice (ver VI.). Luego de ejecutar el algoritmo se obtienen las siguientes gráficas del calor específico:

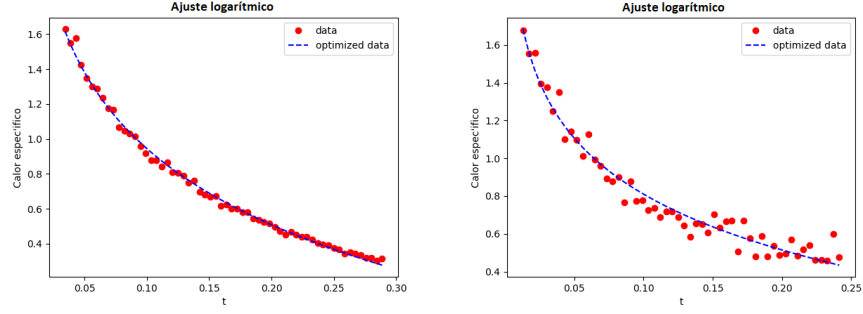


Figura XXXIX: Calor específico vs  $t$ , en la izquierda para temperaturas en  $I_1$  y en la derecha para temperaturas en  $I_2$ .

La correspondiente tabla con los parámetros se muestra en seguida.

Tabla V: Valores de parámetros asociados al calor específico para un ajuste logarítmico.

| Parámetros | $\alpha$ | $R^2$  |
|------------|----------|--------|
| $I_1$      | 0        | 0.9962 |
| $I_2$      | 0        | 0.9675 |

En base a los valores de los parámetros mostrados en la tabla anterior, se puede asegurar que la aproximación anterior es muy buena.

**Caso  $L=50$ .** En esta instancia se aprecia que el calor específico alcanza un máximo en la temperatura 2.27, mientras que la susceptibilidad magnética lo consigue en la temperatura 2.31, por lo tanto la temperatura crítica  $T_c \sim 2.3$ , asimismo a partir de la siguiente figura se observa que muy cerca de  $T_c$  el calor específico oscila más que la susceptibilidad magnética.

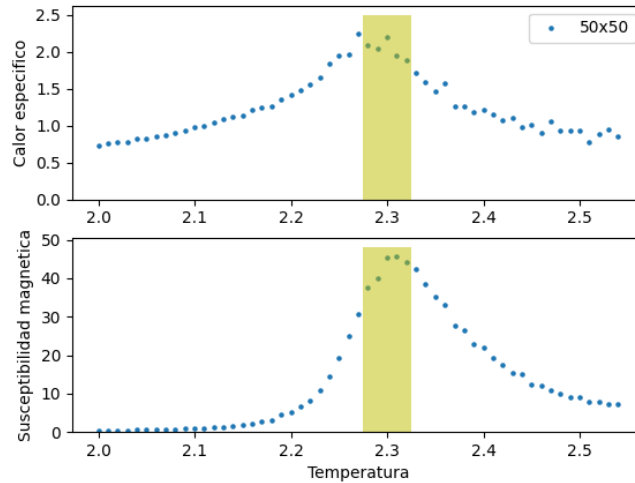


Figura XL: Calor específico vs  $t$ , en la izquierda para temperaturas cercanas a  $T_c$ .

El conjunto de temperaturas  $T$  escogido está incluido en el intervalo  $[2.00, 2.54]$ , específicamente

$$T \in \{2.00 + 0.01 \times i \text{ para } i \leq 54\}$$

y considerando el intervalo de incertidumbre (barra amarilla), se consideran los siguientes subintervalos

$$I_1 = \{2.00 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 28\} \text{ e}$$

$$I_2 = \{2.00 + 0.01 \times i \text{ para } 32 \leq i \leq 54\}.$$

De forma análoga a lo expuesto para el caso  $L = 30$ , se modifica el código y se intentan ajustar los valores del calor específico y la susceptibilidad magnética. Primero se intenta una aproximación potencial.

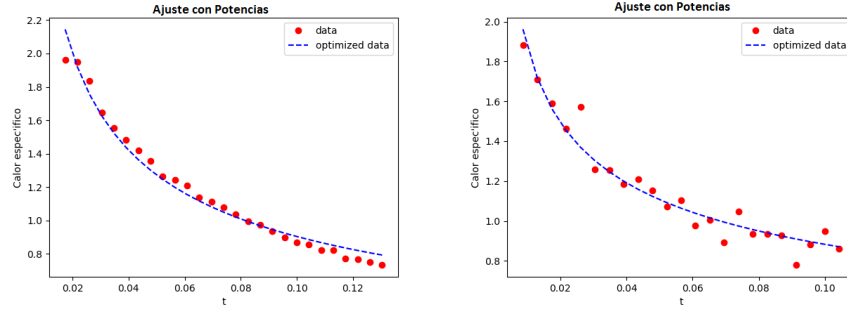


Figura XLI: Calor específico vs  $t$ , en la izquierda para temperaturas en  $I_1$  y en la derecha para temperaturas en  $I_2$ .

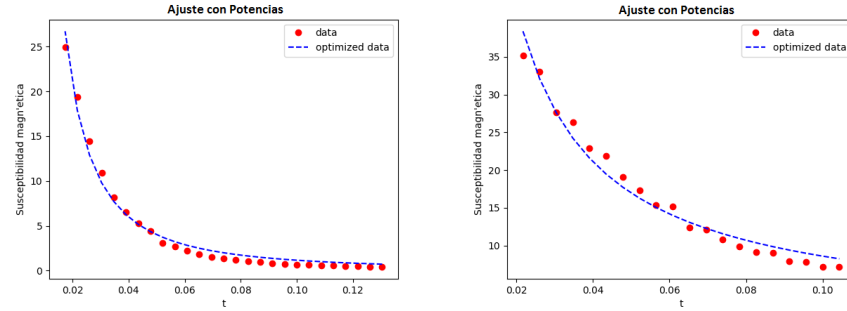


Figura XLII: Susceptibilidad magnética vs  $t$ , en la izquierda para temperaturas en  $I_1$  y en la derecha para temperaturas en  $I_2$ .

Con el fin de examinar que tan fiables son los ajustes anteriores, se hallan los coeficientes  $R^2$ , y se muestran los valores de los exponentes críticos aproximados.

Tabla VI: Valores de parámetros asociados al calor específico y la susceptibilidad magnética.

| Parámetros | $\alpha$ | $R^2$  | Parámetros | $\gamma$ | $R^2$  |
|------------|----------|--------|------------|----------|--------|
| $I_1$      | 0.49     | 0.9785 | $I_1$      | 1.79     | 0.9861 |
| $I_2$      | 0.32     | 0.9497 | $I_2$      | 0.97     | 0.9735 |

Tomando como base los valores mostrados se observa que para el calor específico la aproximación potencial es relativamente buena, en especial para temperaturas inferiores a  $T_c$ . Por otro lado en lo que concierne a la susceptibilidad magnética, el ajuste potencial es muy bueno en el intervalo de temperaturas  $I_1$ , e incluso el valor del exponente crítico  $\gamma$  es muy aproximado al valor  $\frac{7}{4}$  obtenido de la solución de Onsager.

En un intento de un mejor ajuste del calor específico, se ensaya la aproximación logarítmica.

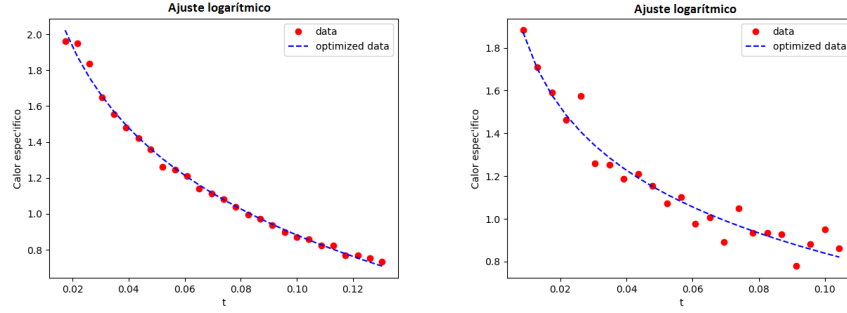


Figura XLIII: Calor específico vs  $t$ , en la izquierda para temperaturas en  $I_1$  y en la derecha para temperaturas en  $I_2$ .

En la siguiente tabla se muestran los valores de los coeficientes  $R_2$  obtenidos.

Tabla VII: Valores de parámetros asociados al calor específico para un ajuste logarítmico.

| Parámetros | $\alpha$ | $R^2$  |
|------------|----------|--------|
| $I_1$      | 0        | 0.9945 |
| $I_2$      | 0        | 0.9546 |

De lo anterior se puede inferir que la aproximación logarítmica es mejor que la potencial, en lo que se refiere al calor específico.

## 2. El algoritmo de Wolff para un cristal SC.

La susceptibilidad magnética y el calor específico se obtienen hallando la varianza de las energías y magnetizaciones de sucesivas inversiones de los clústeres construidos con el algoritmo de Wolff, y bajo esa premisa también se calcula la varianza del tamaño de dichos clústeres. Los demás fragmentos del código son iguales al del modelo en  $d = 2$ , y la gráfica del comportamiento de las tres magnitudes mencionadas respecto de la temperatura  $([2.00, 2.15, 2.30, \dots, 6.20])$  se muestra a continuación.

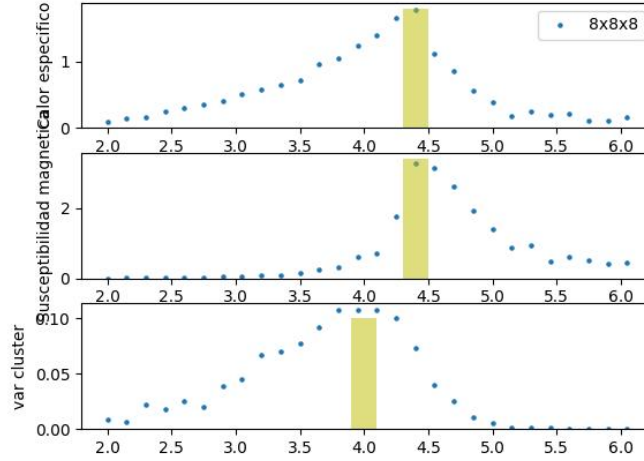


Figura XLIV: De arriba a abajo, gráficas del calor específico, susceptibilidad magnética y varianza del tamaño relativo del clúster respecto de la temperatura.

De las primeras dos gráficas se deduce que la temperatura crítica  $T_c$  pertenece al intervalo  $[4.0, 5.0]$ . Adicionalmente se observa que la varianza del tamaño relativo del clúster presenta un tipo de transición de fase, con un incremento rápido antes de una cierta temperatura y luego un decaimiento pronunciado, mas dicha temperatura difiere de las que se obtiene del calor específico y la susceptibilidad magnética. Esta discrepancia se puede explicar debido a que el clúster construido con el método de Wolff no es necesariamente el más grande, por lo que su contribución magnética puede ser mínima. Por todo lo anterior se procede a estudiar los valores físicos, y se dejan de lado las magnitudes geométricas.

Para un estudio más prolijo del comportamiento del calor específico, la susceptibilidad y la magnetización cerca al punto crítico, se considera una rejilla con  $16 \times 16 \times 16$  espines y se restringe la atención al intervalo de temperaturas  $[4.20, 4.80]$ , en específico la colección de estas es

$$I = \{4.20 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 60\},$$

observándose que el calor específico alcanza un máximo en la temperatura 4.45 mientras que la susceptibilidad lo hace en 4.51, por lo cual la temperatura crítica debe ser  $\sim 4.48$ . Lo anterior se plasma en las siguientes gráficas:

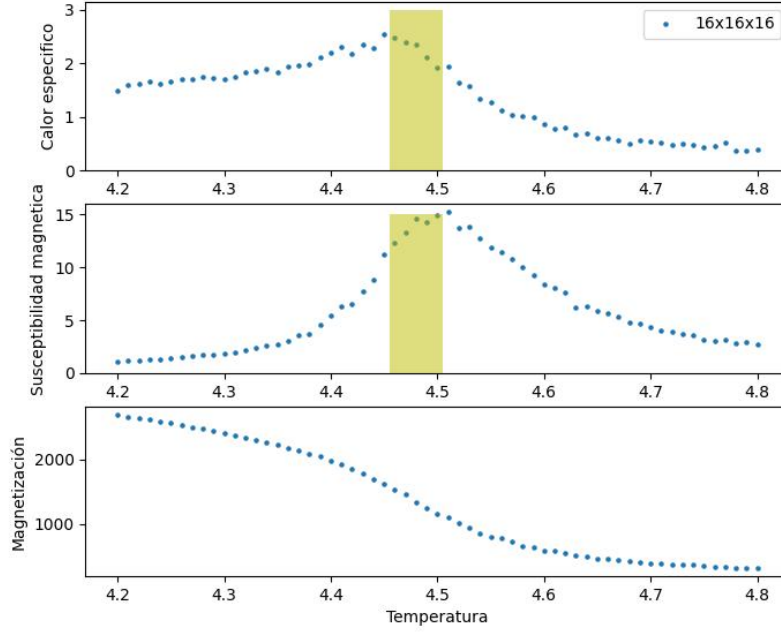


Figura XLV: Gráficas del calor específico, la susceptibilidad magnética y la magnetización absoluta en función de la temperatura.

Las barras amarillas muestran la región de incertidumbre de la simulación, por lo cual se procede a trabajar con los subconjuntos

$$I_1 := \{4.20 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 25\} \quad \text{e}$$

$$I_2 := \{4.55 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 25\},$$

uno debajo de  $T_c$  (cuyo valor se puede comparar con el dado por [14]p.14) y el segundo encima.

Se explora un ajuste de curvas del tipo potencial de los tres observables previos, obteniéndose las siguientes figuras:

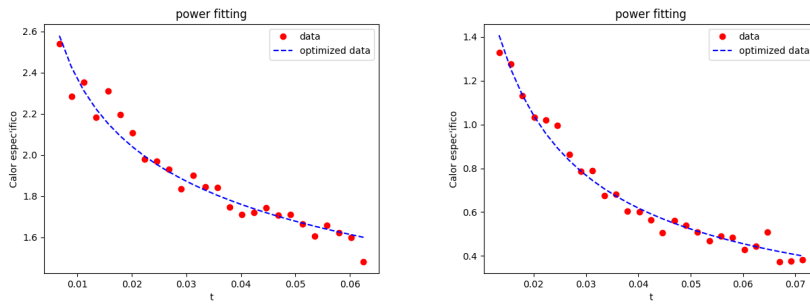


Figura XLVI: Calor específico en función de  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ , para  $T$  en  $I_1$  (izquierda) e  $I_2$  (derecha).

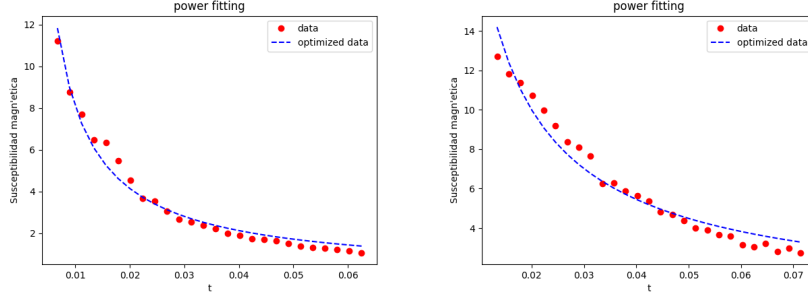


Figura XLVII: Susceptibilidad magnética para temperaturas en  $I_1$  (izquierda) y  $I_2$  (derecha).

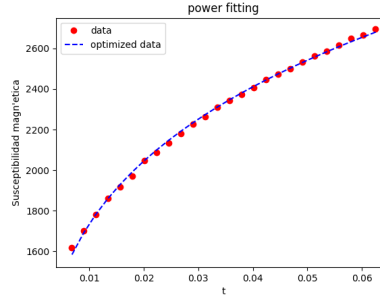


Figura XLVIII: Magnetización para temperaturas en  $I_1$ .

El ajuste realizado provee un exponente crítico, además del parámetro de fiabilidad  $R^2$ :

Tabla VIII: Valores de parámetros asociados al calor específico, susceptibilidad magnética y la magnetización.

| Parámetros | $\alpha$ | $R^2$  | Parámetros | $\gamma$ | $R^2$  | Parámetros | $\beta$ | $R^2$  |
|------------|----------|--------|------------|----------|--------|------------|---------|--------|
| $I_1$      | 0.21     | 0.9503 | $I_1$      | 0.96     | 0.9788 | $I_1$      | 0.23    | 0.9985 |
| $I_2$      | 0.75     | 0.9798 | $I_2$      | 0.87     | 0.9620 |            |         |        |

### 3. El algoritmo de Swendsen-Wang para un cristal SC.

A diferencia del algoritmo de Wolff, donde las magnitudes físicas obtenidas no eran apropiadamente descritas por las magnitudes geométricas, en el algoritmo de Swendsen-Wang sí debería haber una adecuada correspondencia entre ambas, basándose en el desarrollo teórico mostrado en la subsección 3.2.2 (basado en [7]), donde se muestra que la magnetización absoluta es casi igual al tamaño relativo del mayor clúster, además la susceptibilidad magnética está relacionada a la varianza del tamaño del mayor clúster.

Se considera una rejilla con  $18 \times 18 \times 18$  espines, así como temperaturas  $T$  en

$$I = \{4.20 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 45\}$$

Las gráficas del calor específico y la susceptibilidad magnética en función de la temperatura se muestran en seguida.

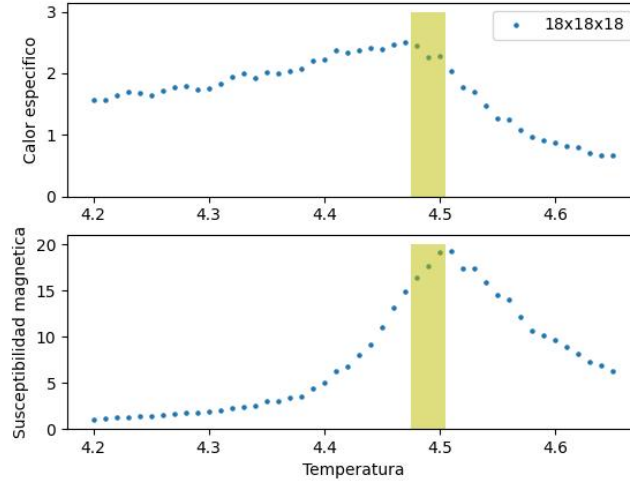


Figura XLIX: Calor específico y susceptibilidad magnética.

El valor máximo del calor específico corresponde a la temperatura 4.47 y el de la susceptibilidad magnética a 4.51, por lo que se elige como temperatura crítica la media de ambos valores, es decir  $T_c = 4.49$ . Con el objetivo de estudiar el comportamiento de los observables cerca a  $T_C$ , se divide el intervalo  $I$  en dos subconjuntos:

$$I_1 = \{4.20 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 25\} \text{ e}$$

$$I_2 = \{4.51 + 0.01 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 14\},$$

y debido a que el segundo grupo posee muy pocos puntos, sólo se trabajará con el primero. A continuación se muestran las gráficas de los ajustes con potencias del calor específico, la susceptibilidad magnética y la magnetización:

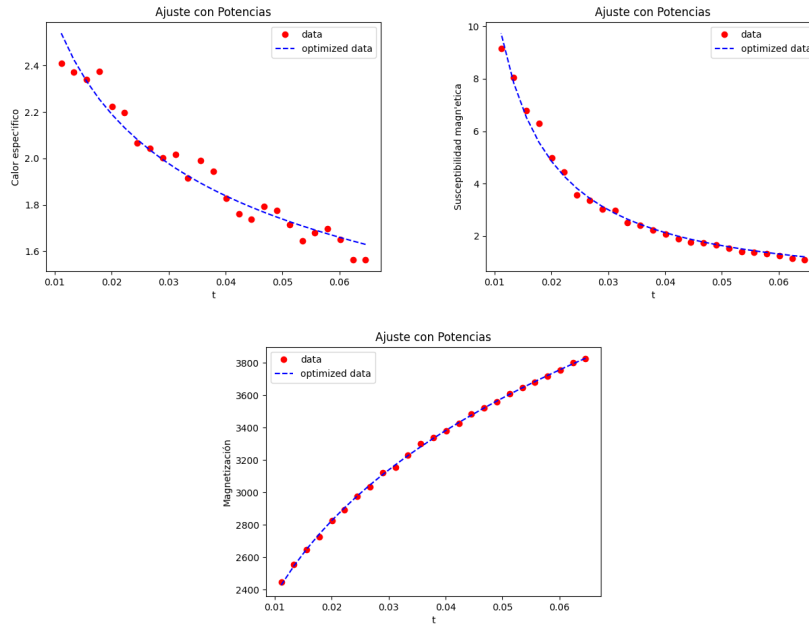


Figura L: Ajuste de curvas para el calor específico, la susceptibilidad magnética y la magnetización en función de  $t = \frac{T_C - T}{T_C}$ , para temperaturas en  $I_1$ .

La tabla con los exponentes críticos  $\alpha, \beta, \gamma$  y el coeficiente de ajuste  $R^2$  se muestra a

continuación:

Tabla IX: Valores de  $\alpha, \beta, \gamma$ .

| Parámetros | $\alpha$ | $\beta$ | $\gamma$ |
|------------|----------|---------|----------|
| $I_1$      | 0.25     | 0.26    | 1.19     |
| $R^2$      | 0.96     | 0.99    | 0.99     |

Enseguida se compara el comportamiento de la magnetización respecto al tamaño del mayor clúster, lo cual se ilustra en la siguiente gráfica:

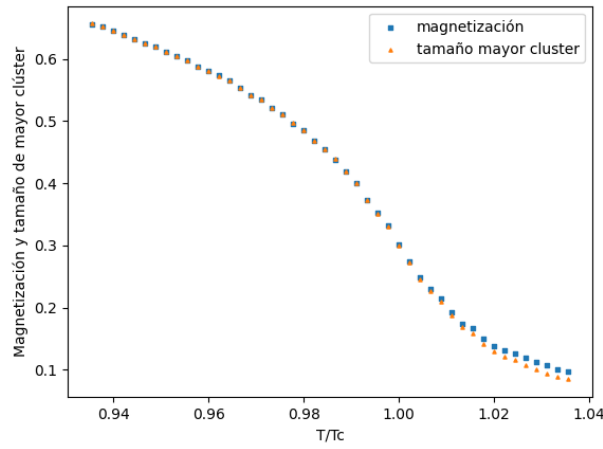


Figura LI: Comparación entre la magnetización y el tamaño del mayor clúster, en función de  $\frac{T}{T_c}$ , donde  $T \in I$ .

Se observa que para temperaturas menores o iguales a  $T_c$  ambas magnitudes son casi iguales, de hecho, si  $\langle |M| \rangle_T$  y  $\langle P_\infty \rangle_T$  representan la magnetización y el tamaño relativo del mayor clúster a la temperatura  $T$ , entonces

$$\max_{T \in I_1} \frac{\langle |M| \rangle - \langle P_\infty \rangle_T}{\langle |M| \rangle_T} \times 100\% < 1\%,$$

$$\text{Promedio}_{T \in I_1} \frac{\langle |M| \rangle_T - \langle P_\infty \rangle_T}{\langle |M| \rangle_T} \times 100\% < 0.1, \%$$

lo que demuestra que  $\langle |M| \rangle_T$  y  $\langle P_\infty \rangle_T$  son muy similares para temperaturas inferiores a la crítica.

En segundo lugar se comparan la susceptibilidad magnética y la varianza del tamaño del clúster mayor, en función de la temperatura, obteniéndose la siguiente gráfica.

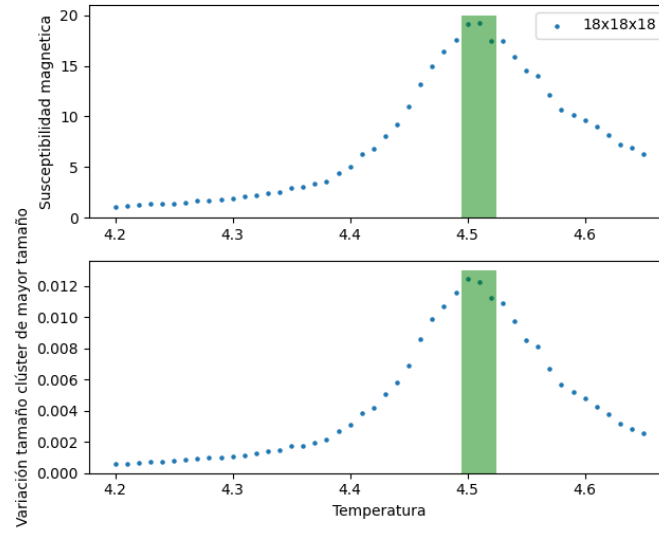


Figura LII: Comparación entre la susceptibilidad magnética y la varianza del tamaño del mayor clúster, para diversas temperaturas  $T \in I$ .

Debido a la similitud de la distribución de los datos, se procede a realizar un ajuste con potencias de los valores obtenidos para la varianza del cardinal del mayor clúster, obteniéndose la siguiente gráfica:

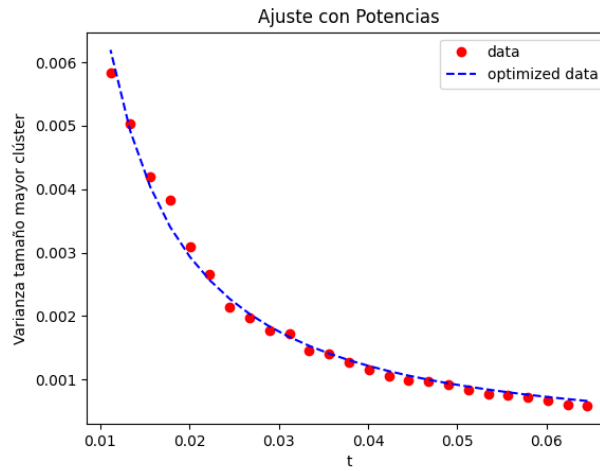


Figura LIII: Varianza del tamaño del clúster mayor en función de  $t = \frac{T_C - T}{T_C}$ , donde  $T \in I_1$ .

Dicho ajuste provee un parámetro, denotado como  $\xi$ , cuyo valor y fiabilidad se exponen en seguida:

Tabla X: Valor de  $\xi$ .

| Parámetro | $\xi$ |
|-----------|-------|
| $I_1$     | 1.27  |
| $R^2$     | 0.99  |

#### 4. El algoritmo de Wolff para un cristal BCC.

Primero se decide considerar sólo la interacción de vecinos de la primera y segunda capa, por lo tanto en el código VI. se tiene  $e = 0.56$ ,  $h = 1$ . La red tiene dimensiones  $8 \times 8 \times 8$  y el conjunto de temperaturas

$$I = \{4.0 + 0.2 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 24\},$$

obteniéndose las siguientes figuras:

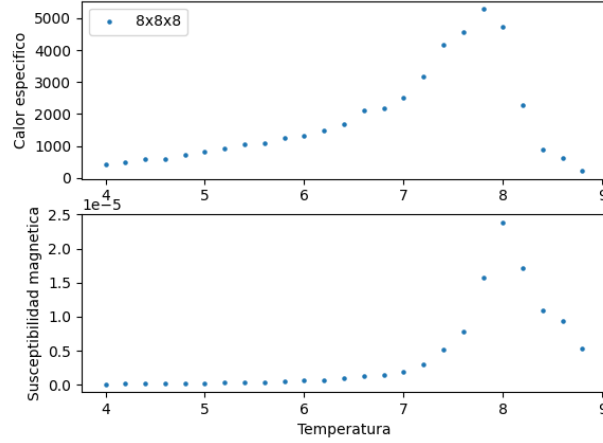


Figura LIV: Calor específico y susceptibilidad magnética para diversas temperaturas - 1.

Las gráficas muestran que el calor específico alcanza el máximo en la temperatura 7.8 mientras que la susceptibilidad lo hace en 8.0, por lo tanto se deduce que  $T_C \sim 7.9$ .

Posteriormente se incrementa el tamaño de la rejilla a  $12 \times 12 \times 12$ , y el nuevo conjunto de temperaturas es

$$I = \{5.0 + 0.2 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 19\},$$

obteniéndose las siguientes gráficas:

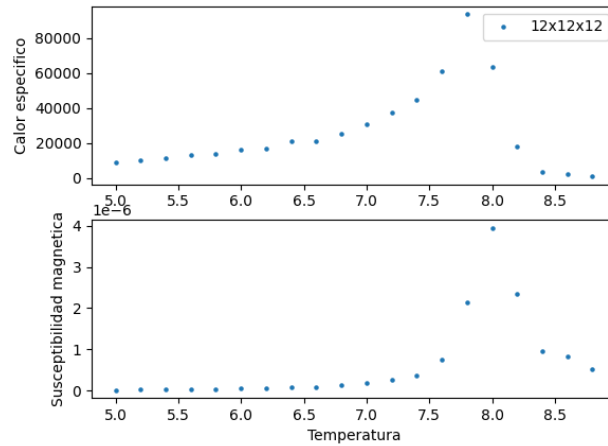


Figura LV: Calor específico y susceptibilidad magnética para diversas temperaturas - 2.

En esta situación el calor específico alcanza su máximo en la temperatura 7.8 y la susceptibilidad lo hace en 8.0, por lo que también se deduce que  $T_C \sim 7.9$ .

En segundo lugar se consideran también las interacciones entre vecinos de las capas 3,4,...,10, y con ese objetivo se aproxima la relación de las constantes  $h$ ,  $e$  a 1 : 0.2. La red elegida tiene dimensiones  $10 \times 10 \times 10$  y el conjunto de temperaturas es

$$I = \{5.0 + 0.2 \times i \text{ para } 0 \leq i \leq 19\},$$

obteniéndose las siguientes figuras:

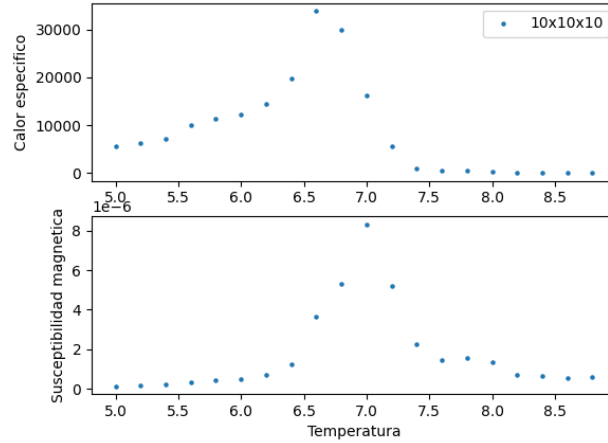


Figura LVI: Calor específico y susceptibilidad magnética para diversas temperaturas - 3.

El primer observable alcanza el máximo en la temperatura 6.6 mientras que el segundo lo hace en 7.0, de lo que se deduce que  $T_C \sim 6.8$ .

## C. Observaciones.

Provistos de los resultados obtenidos en las subsecciones precedentes, se muestran a continuación las siguientes inferencias.

♣ De la evaluación del algoritmo de Wolff en dos dimensiones se colige:

- El comportamiento de la simulación, para  $L = 30$  y  $50$ , es más suave para temperaturas menores a  $T_c$  y más irregular para temperaturas mayores.
- En ambos casos los valores aproximados de la temperatura crítica  $T_C$  presentan una discrepancia con el valor teórico provisto por la solución de Onsager, pero en la rejilla de dimensiones mayores este error es menor. El mejor valor obtenido de  $T_C$  es 2.30.
- El ajuste potencial es apropiado para la susceptibilidad magnética, en especial para temperaturas menores a  $T_c$ . En el caso de la rejilla con  $L = 50$  el exponente crítico  $\gamma$  toma el valor 1.79 para temperaturas menores a  $T_C$ , muy próximo al valor 1.75 que proviene de estudios analíticos (ver [14] p.14).
- El ajuste logarítmico es el adecuado para el calor específico, en particular para temperaturas inferiores a  $T_c$ .

- Las fiabilidades (coeficiente  $R^2$ ) de las aproximaciones son similares para ambos tamaños de rejilla, la diferencia radica en que la red más grande aproxima mejor la temperatura crítica teórica  $T_c = 2.27$ .
- Se puede concluir que el modelo de Wolff en dimensión 2 se condice con el modelo analítico de Ising bidimensional (ver el capítulo 1, subsección 1.22) en el sentido de que el calor específico diverge logarítmicamente cerca de  $T_c$ , y que la susceptibilidad magnética diverge como una potencia en dicho entorno.

♣ De la aplicación del algoritmo de Wolff para estudiar un cristal SC se infiere:

1. Para una rejilla con  $16 \times 16 \times 16$  espines el valor de  $T_C$  es igual a 4.48. Esta cantidad es muy cercana a 4.55, la cual es obtenida en ver [6] Figura 1.
2. La varianza del tamaño relativo del clúster construido presenta una clase de transición de fase, pero no es de utilidad para determinar la temperatura crítica.
3. Los exponentes críticos  $\alpha, \beta$  y  $\gamma$  toman los valores 0.21, 0.23 y 0.96 para temperaturas menores a  $T_C$ , en comparación con los valores 0.11, 0.32 y 1.24 provisto por otras estimaciones (ver [14] p.14). Tomando como referencia el caso bidimensional, es esperable que para rejillas mayores los valores sean más cercanos.
4. Para temperaturas mayores a  $T_C$  los exponentes críticos están más alejados de los valores provistos por 14 p.14.
5. La fiabilidad del ajuste de curvas es mejor para la magnetización.

♣ De la aplicación del algoritmo de Swendsen y Wang para estudiar un cristal SC se concluye:

1. Para una rejilla con  $18 \times 18 \times 18$  espines el valor de  $T_C$  es 4.49, también muy cercano al valor 4.55, obtenido en [6] Figura 1.
2. Para temperaturas inferiores a  $T_C$  los valores calculados de los exponentes críticos  $\alpha, \beta$  y  $\gamma$  son 0.25, 0.26 y 1.19, respectivamente. Comparando con los valores provistos por [14] p.14, los dos últimos parámetros se aproximan mejor en comparación con los del algoritmo de Wolff.
3. Las fiabilidades (coeficientes  $R^2$ ) son similares a obtenidos con el algoritmo de Wolff.
4. Para temperaturas menores a  $T_C$  el tamaño relativo del clúster de mayor cardinal es muy parecido a la magnetización absoluta.
5. El parámetro  $\xi$  de la varianza del tamaño relativo del mayor clúster toma el valor 1.27, que es muy cercano al exponente crítico  $\gamma$ , por lo tanto cerca al punto crítico dicha varianza y la susceptibilidad magnética son iguales, salvo un factor multiplicativo.

♣ De la evaluación del algoritmo de Wolff para una red BCC se observa:

1. En el caso en que la relación de  $h$  y  $e$  es 1 : 0.56, tanto para la rejilla con  $8 \times 8 \times 8$  espines como para el de  $12 \times 12 \times 12$ , se observa que la temperatura crítica es  $\sim 7.9$ .
2. En base a los valores de las energías de intercambio de un cristal BCC de hierro (ver subsección 4.1.4) y a la constante de Boltzmann ( $1.38 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$ ), entonces la temperatura crítica estimada del hierro es igual a  $7.9 \times 225 \text{ K} \sim 1770 \text{ K}$ .
3. En el caso en que la relación de  $h$  y  $e$  es 1 : 0.20, donde la rejilla tiene  $10 \times 10 \times 10$  espines se observa que la temperatura crítica es  $\sim 6.8$ .

4. En base a los valores de las energías de intercambio de un cristal BCC de hierro (ver subsección 4.1.4) y a la constante de Boltzmann ( $1.38 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$ ), se tiene que la temperatura crítica estimada del hierro es igual a  $\sim 1530$  K.
5. El valor experimental de la temperatura  $T_C$  del hierro es  $\sim 1040$  K, el cual discrepa notablemente de los dos valores obtenidos líneas arriba, pero la diferencia es menor cuando se introducen las interacciones entre vecinos más alejados. Si estas contribuciones se consideraran más apropiadamente posiblemente las temperaturas estimadas serían más fiables.

## V. Conclusiones.

A partir de las observaciones hechas en el capítulo precedente, se obtienen las siguientes conclusiones:

1. Para rejillas cuadradas bidimensionales el algoritmo de Wolff aproxima bien los valores analíticos de la temperatura crítica y los exponentes críticos del calor específico y la susceptibilidad magnética. Se aprecia que para rejillas más grandes la aproximación es mejor.
2. Para rejillas cúbicas simples el algoritmo de Wolff aproxima bien los valores de la temperatura crítica y los exponentes críticos del calor específico, magnetización y susceptibilidad magnética obtenidos mediante otros algoritmos. También se comprueba que en este modelo no se pueden usar las magnitudes geométricas para estudiar magnitudes físicas. A medida que las dimensiones de la red se incrementan la aproximación es mejor.
3. Para redes cúbicas simples el algoritmo de Swendsen-Wang aproxima muy bien los valores de la temperatura crítica y los exponentes críticos del calor específico, magnetización y susceptibilidad magnética obtenidos mediante otros algoritmos. En comparación con el algoritmo de Wolff las aproximaciones son mejores. En este caso sí hay una correspondencia entre las magnitudes físicas como la magnetización y la susceptibilidad magnética con las magnitudes geométricas tamaño medio y varianza del tamaño del mayor clúster. También se observa que para redes más grandes las aproximaciones son mejores.
4. Para redes cúbicas centradas en el cuerpo la aproximación de la temperatura crítica provista por el algoritmo de Wolff es menos preciso que en los casos anteriores, en particular para el caso del hierro el valor predicho es un 70% mayor que el valor experimental. Si se consideran no solo las interacciones entre vecinos inmediatos entonces la temperatura crítica disminuye, dando para el caso del hierro un valor 50% mayor al valor experimental. De lo anterior se puede deducir que si se consideran mejor las interacciones entre los vecinos no inmediatos entonces la temperatura crítica se aproximará mejor a los valores empíricos.

## VI. Recomendaciones.

En base a los resultados y las dificultades observadas en el transcurso de la elaboración del presente trabajos se enuncian las siguientes recomendaciones:

1. Con respecto a la parte analítica, se vio que es viable abordar el modelo de Ising bidimensional de una forma más sencilla que la propuesta originalmente por Onsager, por lo que es recomendable buscar una simplificación aun mayor y simultaneamente hacer nuevas predicciones.
2. Los algoritmos de Wolff y de Swendsen-Wang muestran importantes ventajas computacionales respecto al algoritmo de muestra local, pero para redes grandes el tiempo de cálculo se ralentiza cerca de la temperatura crítica. Esto se debe en parte al lenguaje de programación usado (Python) por lo cual el uso de otro (como C++) podra agilizar las simulaciones. Además un clúster de computadoras potenciaría más el trabajo.
3. En las simulaciones sobre las redes cúbicas centradas en el cuerpo se notó una discrepancia notable entre los resultados experimentales del hierro y los provistos por el modelo de Ising. Si se consideran no sólo los vecinos inmediatos sino los de segundo o tercer orden, es posible que los valores calculados de la temperatura crítica y otros observables sean más precisos, por lo cual se deberían dedicar esfuerzos en ese sentido.
4. El algoritmo de Swendsen-Wang se podra refinar, en particular la parte estadística, para obtener un comportamiento más suave de los exponentes críticos. Se pueden obtener mejores resultados si se trabaja en esta dirección.

## VII. Bibliografía

- [1] A.Aharoni. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism* . Oxford University Press, 2007.
- [2] S. Axler. *Linear Algebra Done Right*. Springer International Publishing, 2015.
- [3] R.J.Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press Limited, 1989.
- [4] A.J.Beekman, L.Rademaker and J. van Wezel. An Introduction to Spontaneous Symmetry Breaking. *arXiv:1909.01820v2*, 2019.
- [5] S.Blundell. *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University Press, 2001.
- [6] K.Das, N.Vadakkayil and S.Das. “Aging Exponents for Nonequilibrium Dynamics following Quenches from Critical Point”. *Physical Review E* 101, 062112, 2020.
- [7] M. De Meo, D.Heermann and K. Binder. “Montecarlo Study of de Ising Model Phase Transition in of the Percolation Transition of Physical Clusters”. *Journal of Statistical Physics*, Vol 60, Nos. 5/6, 1990.
- [8] D.Forster. *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions*. Addison-Wesley Publishing Co, 1990.
- [9] G.Grimmett. *The random-cluster model*. Springer-Verlag, 2006.
- [10] R. Horn. *Topics in Matrix Analysis*. Cambride University Press, 1991.
- [11] K.Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons, 1987.
- [12] J.D.Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley and Sons, 1999.
- [13] P.M.Kasteleyn. “Dimer Statistics and Phase Transitions”. *Journal of Mathematical Physics*, 1963.
- [14] S.A.Kivelson, J.M.Jiang and J.Chang. *Statistical Mechanics of Phases and Phases Transitions* . Princenton University Press, 2024.
- [15] W.Krauth. *Algorithms and Computations*. Oxford University Press, 2006 .
- [16] C.Liu. “Classical Spontaneous Symmetry Breaking”. *The University of Chicago Press Journals*, 2003.
- [17] D.C.Mattis. *The Theory of Magnetism I*. Springer-Verlag, 1988.
- [18] B.M.McCoy and T.T.Wu. *The 2-dimensional Ising model*. Harvard University Press, 1973.
- [19] J.R.Norris. *Markov Chains*. Cambridge University Press, 2009.

- [20] M.Pajda, J.Kudrnovsky, I.Turek, V.Drchal and P.Bruno. “Ab initio calculations of exchange interactions, spin-wave stiffness constants, and Curie temperatures of Fe, Co, and Ni.” *Physics Review B*.64.174402, 2000.
- [21] R.E.Raab and O.L.De Lange. *Multipole Theory in Electromagnetism*. Oxford University Press, 2005.
- [22] F.Schwabl. *Statistical Mechanics*. Springer-Verlag Berlin, 2006 .
- [23] A.Steinberg, M.Kosowsky and S.Fraden. *Simulations: The Ising Model*. Physics Department, Brandeis University, 2013.
- [24] J.S.Wang, O.Kozan and R.H.Swendsen. “Montecarlo methods in scientific computing”. *Physical Review E*66 (2002) 057101.
- [25] U. Wolff. “Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems”. *Physical Review Letters*, Vol 62, No. 4, 1989.

## Anexos

|                                               |    |
|-----------------------------------------------|----|
| Anexo 1: Mecánica estadística. . . . .        | 1  |
| Anexo 2: Mecánica cuántica. . . . .           | 3  |
| Anexo 3: Fundamentos matemáticos. . . . .     | 6  |
| Anexo 4: Dímeros. . . . .                     | 10 |
| Anexo 5: Scripts de las simulaciones. . . . . | 15 |

## Anexo 1: Mecánica estadística.

Un sistema termodinámico consta de un número de partículas del orden de  $10^{23}$ , por lo que el estudio de la evolución de una configuración (*microestado*) es inviable. Afortunadamente gracias a argumentos experimentales y matemáticos, como la teoría ergódica, se puede estudiar el sistema mediante un colectivo de microestados distribuidos según una estadística (*macroestado*), especificado por las variables de estado macroscópicas  $P, V, T$ , etc.

Un *colectivo microcanónico* involucra a un sistema completamente aislado del exterior, donde el número de partículas  $N$  y el volumen  $V$  permanecen constantes, en tanto que la energía  $E$  se mantiene en un estrecho intervalo  $[E', E' + \Delta]$ . En este contexto todos los microestados admisibles tienen igual probabilidad.

En el caso de un *colectivo canónico* el sistema a estudiar está contenido en otro mucho mayor, de manera que puede intercambiar energía con este mas no partículas. En esta situación los microestados aceptables  $\sigma$  tienen una probabilidad  $\frac{\exp(-\beta E_\sigma)}{Z}$ , donde

$$Z = \sum_{\sigma} \exp(-\beta E_{\sigma}),$$

es la función de partición.

En el presente trabajo se usan colectivos canónicos, y en este escenario se definen algunas funciones macroscópicas, denominadas potenciales termodinámicas, que dependen de algunas magnitudes medibles, como la presión, temperatura, volumen, etc.

**Energía libre (de Helmholtz)**  $F = F(T, N, V) = -kT \log Z$ .

**Entropía**  $S = S(E, N, V) = -(\frac{\partial F}{\partial T})_{V, N} = \log(Z \exp(\beta E))$ .

**Energía interna**  $E = E(S, N, V) = F + TS = T^2 \frac{\partial \log Z}{\partial T}$ .

**Energía libre (de Gibbs)**  $G = G(T, N, P) = E - TS + PV$ .

A partir de las aplicaciones anteriores se definen los derivados termodinámicos. Si tanto el volumen como el número de partículas están fijos, se tiene

**Magnetización**  $M = -(\frac{\partial G}{\partial H})_T$ ,

**El calor específico**  $C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial E}{\partial \beta}$ , con  $\beta$  la inversa de la temperatura,

**Suceptibilidad magnética**  $\chi = (\frac{\partial M}{\partial H})_T$ .

Para el caso particular de un sistema termodinámico con  $N$  partículas descrito por el

modelo de Ising, se tienen las expresiones equivalentes:

$$c_V = \frac{C_V}{N} = \frac{\beta^2}{N}(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2),$$

$$\chi = \frac{\beta}{N}(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2).$$

## Anexo 2: Mecánica cuántica.

En la mecánica cuántica un sistema o una partícula son descritos por una función de onda compleja

$$\Psi(x, \zeta, t) = \psi(x, t)\chi(\zeta),$$

donde  $\psi$  se denomina la función componente espacial y  $\chi$  la función componente de espín. Estas funciones habitan en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ , por otro lado la función real no negativa  $|\Psi|^2$  es una densidad de probabilidad y por lo tanto

$$\int |\Psi(x, \zeta, t)|^2 dx d\zeta = 1 \quad \forall t \geq 0.$$

Sobre el espacio  $\mathcal{H}$ , en particular sobre las funciones  $\Psi$ , actúan operadores lineales; entre los más notables se encuentran:

**El operador posición  $\hat{x}$**  : Se comporta multiplicativamente, es decir

$$[\hat{x}\Psi](x, t) = x\Psi(x, t),$$

y el significado de la expresión

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \Psi^* \hat{x} \Psi dx = \int x |\Psi|^2 dx$$

requiere considerar un colectivo de partículas, todas en el estado  $\Psi$ , de manera que si se miden las posiciones de cada una, la posición media es  $\langle \hat{x} \rangle$ . De forma similar actúan los operadores  $\hat{y}$  y  $\hat{z}$ .

**El operador momento  $\hat{p}$**  : Se ejecuta de la siguiente manera

$$\hat{p}\Psi = -i\hbar \nabla \Psi, \tag{1}$$

y el significado de

$$\langle \hat{p} \rangle = \int \Psi^* \hat{p} \Psi dx = -i\hbar \int \Psi^* \nabla \Psi dx,$$

es similar al caso anterior.

**El operador momento angular  $\hat{L}$**  : Tomando como referencia la definición del momento angular en la mecánica clásica, se define como

$$\hat{L} = -i\hbar \hat{r} \times \nabla,$$

donde  $i = \sqrt{-1}$ . En particular se tiene

$$\hat{L}_z = i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

y se define un nuevo operador

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,$$

que conmuta con  $\hat{L}_z$ , es decir

$$\hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 = 0.$$

Se observa que los operadores  $\hbar^2 \hat{L}^2$  y  $\hbar \hat{L}_z$  tienen autovalores  $l(l+1)\hbar^2$  y  $m_l \hbar$ , respectivamente, donde  $l$  toma valores enteros o semienteros positivos mientras que  $m_l \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ . El número  $l$  se denomina el *número cuántico del momento angular* y  $m_l$  es conocido como el *número cuántico magnético*.

Lo anterior se puede sintetizar aseverando que los electrones de un átomo tienen asociados los números  $l$  y  $m_l$ , por lo tanto el componente del momento angular orbital en la dirección  $Z$  es igual a  $m_l \hbar$  y la magnitud de dicho momento es  $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ , por lo cual la componente del momento magnético respecto al eje  $Z$  es  $-m_l \mu_B$  y la magnitud total de dicho momento es igual a  $\sqrt{l(l+1)}\mu_B$ .

**El operador momento angular intrínseco o espín  $\hat{S}$ :** En adición a lo anterior, los electrones poseen un momento magnético intrínseco asociado a un momento angular también inherente caracterizado por el número  $s = \frac{1}{2}$ . Esta propiedad es representada por el operador  $\hat{S}$ , que se define a partir de las *matrices de Pauli*:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

mediante la igualdad

$$\hat{S} = \frac{1}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z).$$

De forma semejante al momento angular, se define  $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ , cuyo autovalor es  $s(s+1)$ . Paralelamente el operador  $\hat{S}_z$  tiene autovalores  $\pm m_s$ , con  $m_s = \frac{1}{2}$ . Lo presentado se resume asegurando que el momento intrínseco de un electrón tiene una magnitud  $\frac{\sqrt{3}\hbar}{2}$  y su componente en el eje  $Z$  toma valores en  $\{\pm \frac{\hbar}{2}\}$ . El momento magnético aunado tiene magnitud  $\frac{\sqrt{3}g\mu_B}{2}$ , con  $g$  una constante conocida como *g-factor* y  $\mu_B$  el *magnetón de Bohr*, y su componente en el eje  $Z$  pertenece a  $\{\pm \frac{g\mu_B}{2}\}$ .

En virtud a que  $\hat{S}_z$  es diagonal, sus autovectores son sencillos, de hecho son los vectores canónicos del espacio  $\mathbb{C}^2$

$$|\uparrow_z\rangle = (1, 0), \quad |\downarrow_z\rangle := (0, 1),$$

por este motivo la función de onda del espín es una combinación lineal de estos vectores

$$\chi = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle,$$

donde se prescinde del subíndice  $z$ , y se cumple

$$|a|^2 + |b|^2 = 1.$$

**El operador potencial  $V$ :** Usualmente este operador es independiente del tiempo y actúa multiplicativamente

$$(V\Psi)x = V(x)\Psi(x).$$

**El operador Hamiltoniano**  $\hat{H}$  : Uno de los operadores más importantes, se define como

$$\hat{H}\Psi = \frac{\hat{p}^2\Psi}{2m} + V\Psi.$$

La ecuación de Schrodinger involucra a este operador

$$\hat{H}\Psi = ih\frac{\partial\Psi}{\partial t},$$

que en el caso de  $V$  independiente del tiempo, tiene como solución general

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \exp(-\frac{iE_n t}{h}),$$

donde las funciones  $\psi_n$  son soluciones de

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad \forall n \geq 1.$$

## Anexo 3: Fundamentos matemáticos.

### Probabilidad.

En el capítulo II se observó cómo el modelo de Ising muestra, usando métodos analítico, una transición de fase en un sistema ferromagnético. Un enfoque más probabilístico fue propuesto por Fortuin y Kasteleyn, entre cuyas virtudes están la asociación del modelo de Ising a un problema de percolación además y la facilitación de simulaciones numéricas. Adicionalmente este tratamiento está íntimamente relacionado con los algoritmos de Swendsen y Wang, y por lo tanto con el de Wolff. Las demostraciones y aclaraciones se pueden encontrar en [9].

Tal como se introdujo previamente, se trabaja con un conjunto de nodos  $\mathcal{S} := \{(i, j) : 0 \leq i, j \leq L\}$  y aristas  $\mathcal{A} := \{< x, y > : x, y \in \mathcal{S}; \|x - y\| = 1\}$ . En cada nodo hay una partícula con espín 1 o  $-1$ , motivo por el que se tiene una colección de configuraciones de espines  $\sigma \in \{\pm 1\}^{\mathcal{S}}$ . De forma similar se tienen configuraciones de aristas  $\eta$  que cumplen

$$\begin{aligned}\eta_{xy} = \eta_{<x,y>} &= 1 \text{ si arista } <x, y> \text{ está conectada (cerrada),} \\ \eta_{xy} = \eta_{<x,y>} &= 0 \text{ si arista } <x, y> \text{ está desconectada (abierta),}\end{aligned}$$

es decir  $\eta \in \{0, 1\}^{\mathcal{A}}$ . Dos aristas son *adyacentes* si comparten un nodo, además un par de aristas cerradas  $\alpha, \alpha'$  están *comunicadas* si existe una sucesión de aristas adyacentes cerradas tales que  $\alpha$  es la primera y  $\alpha'$  la última. Un *cluster* es una colección de aristas cerradas comunicadas entre si, de manera que no está incluido propiamente en un conjunto similar.

**Definición ..1.** Una medida cluster-aleatoria  $P_p$  en  $\{0, 1\}^{\mathcal{A}}$ , con parámetro  $p \in [0, 1]$ , se define como

$$P_p \eta = \hat{Z}^{-1} \prod_{<x,y>} p^{\eta_{xy}} (1-p)^{1-\eta_{xy}} q^{c(\eta)},$$

donde  $c(\eta)$  es el número de clusters en  $\eta$  y

$$\hat{Z} = \sum_{\eta} \prod_{<x,y>} p^{\eta_{xy}} (1-p)^{1-\eta_{xy}} 2^{c(\eta)}.$$

es la función de partición.

De forma paralela se define una medida de probabilidad en el espacio de configuraciones de espines.

**Definición ..2.** Dada  $\sigma \in \{\pm 1\}^{\mathcal{S}}$  se determina

$$Q_{\beta, J} \sigma = \bar{Z}^{-1} \exp^{-\beta H(\sigma)}, \quad (2)$$

donde  $\beta, J \in ]0, \infty[$ ,  $H(\sigma) = -J \sum_{<x,y> \in \mathcal{A}} \sigma_x \sigma_y$  y  $\bar{Z} = \sum_{\sigma} \exp^{-\beta H(\sigma)}$ .

Luego de plantear las definiciones anteriores, Fortuin y Kasteleyn repararon que trabajar las configuraciones de espines y de aristas de manera conjunta proveía de facilidades en el estudio de transiciones de fase, es a partir de ello que se realiza un acoplamiento de dichas medidas.

**Definición ..3.** En el espacio  $\{\pm 1\}^{\mathcal{S}} \times \{0, 1\}^{\mathcal{A}}$  se define la probabilidad

$$P(\sigma, \eta) = Z^{-1} \prod_{\langle x, y \rangle} [(1 - p)\delta_{\eta_{xy}, 0} + p\delta_{\sigma_x \sigma_y, 1}\delta_{\eta_{xy}, 1}], \quad (3)$$

con  $p \in [0, 1]$  y

$$Z = \sum_{\sigma} \sum_{\eta} \prod_{\langle x, y \rangle} [(1 - p)\delta_{\eta_{xy}, 0} + p\delta_{\sigma_x \sigma_y, 1}\delta_{\eta_{xy}, 1}].$$

Como se mencionó líneas arriba,  $P$  es un acoplamiento de  $P_p$  y  $Q$ , lo cual queda expresado en el siguiente teorema.

**Teorema ..1.** Sean  $\beta$  y  $J$  números positivos y  $p = 1 - \exp^{-\beta J}$ , entonces se verifica:

- $\sum_{\eta} P(\sigma, \eta) = Q_{\beta, J} \sigma,$
- $\sum_{\sigma} P(\sigma, \eta) = P_p \eta,$

es decir, la primera marginal de  $P$  coincide con  $Q_{\beta, J}$  y la segunda con  $P_p$ .

En el acoplamiento anterior,  $Q_{\beta, J}$  y  $P_p$  no son independientes, es decir una configuración de espines  $\sigma$  no puede estar asociada a cualquier configuración  $\eta$  de aristas. Recordando que el espacio de configuraciones de espines es  $\{\pm 1\}^{\mathcal{S}}$  y el de aristas es  $\{0, 1\}^{\mathcal{A}}$ , el siguiente teorema puntualiza lo anterior.

**Teorema ..2.** Sean  $\beta, J$  y  $p$  como en el teorema anterior.

- Dada una configuración de aristas  $\eta$ , la probabilidad condicional  $P(\cdot | \eta)$  en  $\{\pm 1\}^{\mathcal{S}}$  se obtiene colocando aleatoriamente espines de manera que en cada cluster de  $\eta$  todos los espines estén alineados (o +1 o -1) y dicha orientación es independiente para clusters distintos.
- Dada una configuración  $\sigma \in \{\pm 1\}^{\mathcal{S}}$ , la probabilidad condicional  $P(\cdot | \sigma)$  en  $\{0, 1\}^{\mathcal{A}}$  queda definida de la siguiente manera: Si  $\langle x, y \rangle$  es tal que  $\sigma_x \neq \sigma_y$  entonces  $\eta_{xy} = 0$ ; en caso  $\sigma_x = \sigma_y$  se tiene que  $\eta_{xy}$  toma valor 1 con probabilidad  $p$  y valor 0 con probabilidad  $1 - p$ .

## Álgebra Lineal.

Los siguientes conceptos y resultados básicos, usados en la presente tesis, se pueden consultar en los libros [2] y [10].

**Definición ..4.** Dada una transformación lineal  $\mathcal{T} : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ , se dice que un número  $c \in \mathbb{C}$  es un autovalor suyo si existe un vector  $v \in \mathcal{V}$  no nulo tal que

$$\mathcal{T}v = cv,$$

además  $v$  se denomina un autovector de  $\mathcal{T}$ .

Toda transformación lineal sobre un espacio  $\mathcal{V}$  de dimensión finita tiene un autovalor, además a autovalores diferentes corresponden autovectores linealmente independientes.

**Definición ..5.** Dada una base  $v_1, v_2, \dots, v_n$  de  $\mathcal{V}$ , cada transformación lineal  $\mathcal{T}$  en  $\mathcal{V}$  tiene asociada una matriz  $\mathcal{M} = (m_{jk})$  de manera que

$$\mathcal{T}v_k = \sum_j m_{jk} v_j \quad \forall 1 \leq k \leq n.$$

Las matrices son en algunos casos más fáciles de abordar que las transformaciones, y de hecho tiene asociadas dos importantes conceptos.

**Definición ..6.** Dada una matriz  $\mathcal{M} = (m_{jk})$ , su traza se define como

$$\text{Tr } \mathcal{M} = \sum_j m_{jj} ,$$

y su determinante como

$$\det \mathcal{M} = \sum_{(p_1, \dots, p_n)} \delta_{p_1, \dots, p_n} m_{p_1, 1} \dots m_{p_n, n} ,$$

donde la suma es sobre todas las permutaciones de  $\{1, 2, \dots, n\}$  y la función  $\delta$  toma valor  $+1$  si la permutación se alcanza con un número par de transposiciones, y  $-1$  si dicha cantidad es impar.

Un espacio  $\mathcal{V}$  puede tener varias bases, por ejemplo  $\{u_1, \dots, u_n\}$  y  $\{v_1, \dots, v_n\}$ .

**Proposición ..3.** Sea  $\mathcal{P}$  la matriz que transforma la base  $\{u_j\}$  en  $\{v_j\}$ , es decir

$$(v_1, \dots, v_n) = \mathcal{P}(u_1, \dots, u_n).$$

Además sean  $\mathcal{M}$  y  $\mathcal{M}'$  las matrices de una transformación lineal  $\mathcal{T}$  respecto a las bases  $\{u_j\}$  y  $\{v_j\}$ , respectivamente, entonces se cumple que

$$\mathcal{M}' = \mathcal{P}^{-1} \mathcal{M} \mathcal{P},$$

con  $\mathcal{P}^{-1}$  la matriz inversa de  $\mathcal{P}$ .

Se verifica la siguiente útil propiedad.

**Proposición ..4.** Sean  $\mathcal{M}$  y  $\mathcal{M}'$  como en la proposición, entonces se cumplen

$$\begin{aligned} \text{Tr } \mathcal{M} &= \text{Tr } \mathcal{M}', \\ \det \mathcal{M} &= \det \mathcal{M}'. \end{aligned}$$

Las matrices se pueden considerar como *matrices por bloques*, es decir compuestas por submatrices:

$$\mathcal{M} = \left( \begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D \end{array} \right),$$

y una propiedad interesante es la que relaciona los determinantes de la primera con los de las submatrices.

**Proposición ..5.** Sea una matriz por bloques  $\mathcal{M}$  como se acaba de presentar, con la salvedad que la submatriz  $A$  es invertible, entonces se satisface la igualdad

$$\det \mathcal{M} = \det A \det (D - CA^{-1}B).$$

Más aun, si  $E$  es una matriz con las dimensiones de las submatrices, tiene determinante 1 y  $A = A'E$ ,  $B = B'E$ ,  $C = C'E$ ,  $D = D'E$ , entonces

$$\det \mathcal{M} = \det \left( \begin{array}{c|c} A' & B' \\ \hline C' & D' \end{array} \right).$$

**Definición ..7.** Dadas dos matrices complejas  $A = (a_{ij})$  de dimensión  $m \times n$  y  $B = (b_{kl})$  de dimensión  $p \times q$ , se define su producto de Kronecker

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix}$$

Entre la multitud de cualidades del producto de Kronecker, en el trabajo presentado se ha usado una en particular.

**Proposición ..6.** Sean  $A, B, C, D$  cuatro matrices de modo que se pueden definir los productos  $AC$  y  $BD$ , entonces se cumple

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD).$$

Finalmente se introduce un tipo de espacio vectorial ampliamente usado en la mecánica cuántica.

**Definición ..8.** Un espacio de Hilbert es un espacio vectorial  $\mathcal{V}$  con un producto interno  $\langle, \rangle$ , de manera que la métrica inducida es completa.

## Análisis complejo.

La teoría de cálculo en variable compleja provee muchas herramientas para estimar integrales, una de las ellas es el teorema del residuo.

**Teorema ..7.** Sea  $\mathcal{C}$  un contorno cerrado simple en el plano complejo, descrito en el sentido positivo. Si una función  $f$  es analítica en el interior de  $\mathcal{C}$ , excepto en un conjunto finito de puntos  $z_1, \dots, z_n$ , entonces

$$\int_{\mathcal{C}} f(z) dz = 2\pi i \sum_{j=1}^n \text{Res}(f, z_j),$$

donde  $\text{Res}(f, z_j)$  es el coeficiente del término de grado -1 en la expansión de Laurent de  $f$  en un entorno de  $z_j$ .

La función logaritmo compleja,

$$\log z = \log r + i(\theta + 2\pi n) \quad \text{con } z = r \exp(i\theta), r > 0, \theta \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{Z},$$

es una aplicación multivaluada, por lo que con el fin de evadir la ambigüedad, se define la rama principal del logaritmo restringiendo los valores de  $\theta$ :

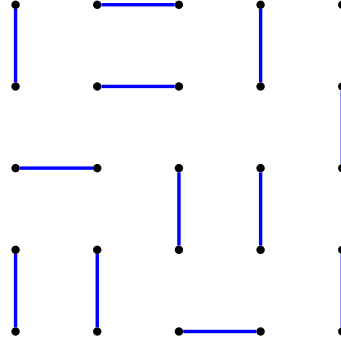
$$\log z = \log r + i\theta \quad \text{con } z = r \exp(i\theta), r > 0, \theta \in ]0, 2\pi[,$$

observándose que en dicho dominio la aplicación es holomorfa. Es a esta función a la que a partir de ahora se llamará logaritmo.

Un *punto de ramificación* de una aplicación es aquel en donde, si se realiza un recorrido circular completo alrededor suyo, la función se vuelve multivaluada. Por ejemplo si la función es  $g(z) = \log(z - 1)$ , un punto de ramificación es  $z = 1$ . Los *cortes de ramificación* se introducen precisamente para evitar la ambigüedad de las funciones multivaluadas alrededor de los puntos de corte. Estos cortes son segmentos o curvas que se retiran para que no se pueda realizar una vuelta completa alrededor de los puntos de corte, por ejemplo la función  $g(z) = \log\left(\frac{z-1}{z+1}\right)$  tiene puntos de corte  $z = \pm 1$ , y un posible corte de ramificación es el segmento que une  $-1$  con  $+1$ .

## Anexo 4: Dímeros.

Un *empaquetamiento de dímeros* es una configuración de nodos y aristas, no necesariamente en una rejilla cuadrada, de modo tal que algunas aristas están cerradas (conectadas) y otras abiertas (desconectadas) y cada nodo es extremo de exactamente una arista cerrada (Ver figura ??).



1

Figura. Empaquetamiento de dímeros en una porción de una red cuadrada, con las aristas conectadas de color azul. El nodo superior derecho está conectado a un nodo no mostrado.

El desarrollo técnico de la teoría de dímeros (ver [18], capítulo IV) está muy relacionada con el concepto de un Pfaffiano, por lo cual se hace una breve presentación del mismo.

**Definición ..9.** Dada una matriz antisimétrica  $A$  con  $2N$  columnas y  $2N$  filas, su Pfaffiano se define como

$$Pf A = \sum_p \delta_p a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \dots a_{p_{2N-1} p_{2N}}, \quad (4)$$

donde la suma es sobre todas las permutaciones  $p = p_1, p_2, \dots, p_{2N}$  de  $\{1, 2, \dots, 2N\}$  que satisfacen

- $p_{2i-1} < p_{2i}$  para todo  $1 \leq i \leq N$  y
- $p_{2i-1} < p_{2i+1}$  para  $1 \leq i \leq N-1$ ,

además  $\delta_p$  es 1 si la permutación se obtiene con número par de transposiciones y -1 si se necesita un número impar de las mismas.

La gran utilidad del Pfaffiano se debe en gran medida a la siguiente proposición

**Proposición ..8.** *Dada una matriz  $A$  con las mismas características enunciadas en la definición anterior. Entonces se cumple que*

$$(PfA)^2 = \det A.$$

**Demostración.** Ver [18], p.47-51. □

Sea una rejilla cuadrada, con  $L$ (par) nodos por lado y por el momento sin condiciones de frontera. Un nodo se simboliza como  $(j, k)$ , donde  $j$  y  $k$  pertenecen a  $\{1, 2, \dots, L\}$  y denotan la fila y columna de un nodo, respectivamente. Además existe una representación equivalente

$$(j, k) \Leftrightarrow p = k + (j - 1)L.$$

Un empaquetamiento está determinado por sus aristas cerradas, debidamente ubicadas en la rejilla, por lo que una configuración particular sería

$$C = |p_1, p_2|p_3, p_4| \dots |p_{L^2-1}, p_{L^2}|,$$

donde  $p_1, p_2, \dots, p_{L^2}$  es una permutación de  $\{1, 2, \dots, L^2\}$  y  $|p_i, p_{i+1}|$  simboliza una arista cerrada. Con el objetivo de que la representación precedente no sea ambigua se exige que se cumpla

- $p_{2i-1} < p_{2i}$  para todo  $1 \leq i \leq L^2$  y
- $p_{2i-1} < p_{2i+1}$  para  $1 \leq i \leq L^2 - 1$ ,

resaltando que dichas condiciones se asemejan a las dadas para un Pfaffiano. La arista  $(p_1, p_2)$  puede estar cerrada o abierta, en función de lo cual se define la función

$$a(p_1, p_2) = \begin{cases} z & \text{si es una arista cerrada ,} \\ 0 & \text{si es una arista abierta ,} \end{cases}$$

con  $z > 0$ , y una definición similar para las otras aristas. En este punto es posible definir la función generatriz del empaquetamiento de dímeros cerrados

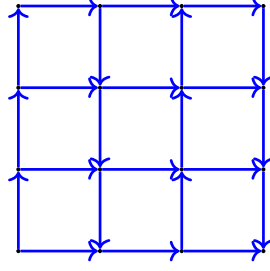
$$Z = \sum_p a(p_1, p_2)a(p_3, p_4) \dots a(p_{L^2-1}, p_{L^2}), \quad (5)$$

donde la suma es sobre todas las permutaciones que satisfacen la condición anterior. Con el objetivo de usar los múltiples resultados del Pfaffiano (ecuación 4) para calcular la expresión 5, bastaría probar la existencia de una familia de funciones,  $s(\cdot, \cdot)$  sobre el conjunto de aristas y con valores en  $\{\pm 1\}$ , de modo tal que para cada permutación  $p = p_1, p_2, \dots, p_{L^2}$  se cumpla

$$\begin{aligned} \delta_p s(p_1, p_2)a(p_1, p_2)s(p_3, p_4)a(p_3, p_4) \dots s(p_{L^2-1}, p_{L^2})a(p_{L^2-1}, p_{L^2}) \\ = a(p_1, p_2)a(p_3, p_4) \dots a(p_{L^2-1}, p_{L^2}). \end{aligned}$$

Afortunadamente éste es el caso, basándose la prueba en argumentos combinatorios y geométricos (ver [18]). Adicionalmente se puede dar una interpretación gráfica a los valores de  $s(\cdot, \cdot)$  de la siguiente manera:

- $s(p_1, p_2) = 1$  entonces existe una flecha de  $p_1$  a  $p_2$ ,
- $s(p_1, p_2) = -1$  entonces existe una flecha de  $p_2$  a  $p_1$ ,



1

Figura. Rejilla cuadrada orientada asociada a  $s$ .

y la rejilla se llama *orientada* si cada arista tiene una flecha correspondiente.

En el gráfico previo se muestra una posible red orientada, o equivalentemente una función  $s(\cdot)$ , con la cual se define la matriz  $A$  de dimensión  $L^2 \times L^2$

$$\begin{aligned}
 A_{(j,k),(j,k+1)} &= -A_{(j,k+1),(j,k)} \\
 &= s((j,k+1), (j,k))a((j,k+1), (j,k)) = (1)z, \quad 1 \leq j \leq L, 1 \leq k \leq L-1, \\
 A_{(j,k),(j+1,k)} &= -A_{(j+1,k),(j,k)} \\
 &= s((j,k), (j+1,k))a((j,k), (j+1,k)) = (-1)^{k+1}z, \quad 1 \leq j \leq L-1, 1 \leq k \leq L, \\
 A_{(j,k),(l,m)} &= 0 \quad \text{otro caso,}
 \end{aligned}$$

que claramente es antisimétrica, y lo más importante

$$Z = PfA.$$

Al principio no se impuso condición alguna sobre la frontera de la rejilla, pero debido a que en los capítulos previos se trabajaron con modelos con bordes periódicos, es necesario trasladar esta característica a las redes estudiadas. Un nodo de la rejilla cuadrada con bordes periódicos se denota por el par

$$(k, l) \text{ tal que } 1 \leq k \leq L+1, \quad 1 \leq l \leq L+1,$$

donde  $(L+1, l) = (1, L)$  y  $(k, L+1) = (k, 1)$  para todo  $k, l$ . Un *dímero con fronteras periódicas* es un dímero donde los nodos  $(L, l), (1, L)$  y  $(k, L), (k, 1)$  pueden estar conectados,  $\forall j, k$ . De forma similar a la expresión 5, se define una función generatriz de dímeros periódicos,  $Z^{per}$ .

Para describir adecuadamente el efecto de los bordes se requieren 4 funciones construidas a partir de la función  $s(\cdot, \cdot)$ , cuyas rejillas orientadas asociadas son:

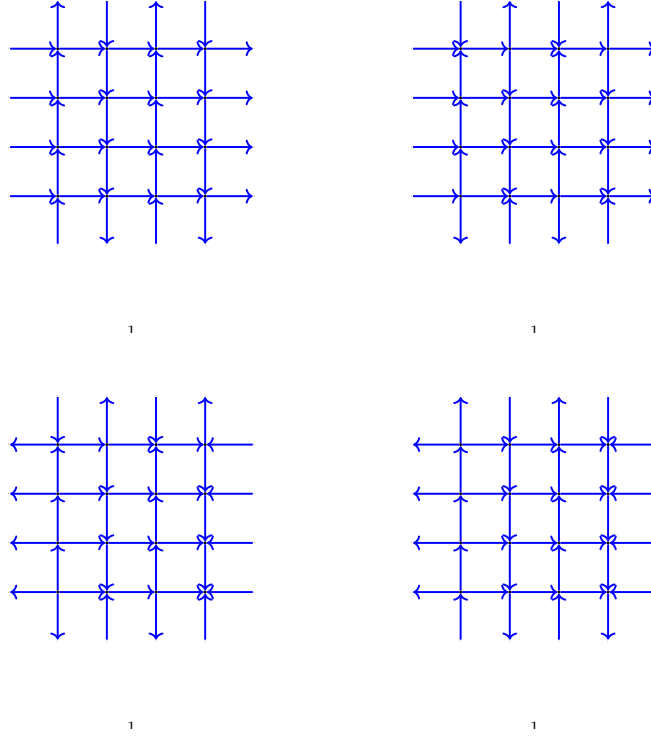


Figura. Desde la esquina superior izquierda, en sentido horario, rejillas asociadas a funciones  $s_1, s_2, s_3$  y  $s_4$ .

Con las mencionadas funciones se definen 4 matrices  $L^2 \times L^2$  que satisfacen las condiciones que definen  $A$ , además de las siguientes:

$$\begin{aligned}
 A_{(j,L),(j,1)}^1 &= -A_{(j,1),(j,L)}^1 \\
 &= s_1((j,L), (j,1))a((j,1), (j,L)) = (1)z, \quad 1 \leq j \leq L, \\
 A_{(L,k),(1,k)}^1 &= -A_{(1,k),(L,k)}^1 \\
 &= s_1((L,k), (1,k))a((L,k), (1,k)) = (-1)^{k+1}z, \quad 1 \leq k \leq L,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_{(j,L),(j,1)}^2 &= -A_{(j,1),(j,L)}^2 \\
 &= s_2((j,L), (j,1))a((j,1), (j,L)) = (1)z, \quad 1 \leq j \leq L, \\
 A_{(L,k),(1,k)}^2 &= -A_{(1,k),(L,k)}^2 \\
 &= s_2((L,k), (1,k))a((L,k), (1,k)) = (-1)^kz, \quad 1 \leq k \leq L,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_{(j,L),(j,1)}^3 &= -A_{(j,1),(j,L)}^3 \\
 &= s_3((j,L), (j,1))a((j,1), (j,L)) = (-1)z, \quad 1 \leq j \leq L, \\
 A_{(L,k),(1,k)}^3 &= -A_{(1,k),(L,k)}^3 \\
 &= s_3((L,k), (1,k))a((L,k), (1,k)) = (-1)^{k+1}z, \quad 1 \leq k \leq L,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_{(j,L),(j,1)}^4 &= -A_{(j,1),(j,L)}^4 \\
&= s_4((j,L), (j,1))a((j,1), (j,L)) = (-1)^j, \quad 1 \leq j \leq L, \\
A_{(L,k),(1,k)}^4 &= -A_{(1,k),(L,k)}^4 \\
&= s_4((L,k), (1,k))a((L,k), (1,k)) = (-1)^k, \quad 1 \leq k \leq L,
\end{aligned}$$

y se demuestra que la función generatriz  $Z^{per}$  satisface

$$Z^{per} = \frac{1}{2}(-PfA_1 + PfA_2 + PfA_3 + PfA_4.) \quad (6)$$

## Anexo 5: Scripts de las simulaciones.

En el presente capítulo se presentan los diversos códigos en Python usados para simular los modelos de Ising en 2D y 3D.

### Algoritmo basado en la enumeración de configuraciones.

```
import math, os
import matplotlib.pyplot as plt
L = 6
N = L * L
filename = r'C:\Users\GUSTAVO\Desktop\PY4E\StatMech\8.Ising\data_dos_L6.txt' #
                                                % L
if os.path.isfile(filename):
    dos = {}
    f = open(filename, 'r')
    for line in f:
        E, N_E = line.split()
        dos[int(E)] = int(N_E)
    f.close()
else:
    exit('input file missing')
list_T = [0.5 + 0.5 * i for i in range(10)]
cv_list=[]
for T in list_T:
    Z = 0.0
    E_av = 0.0
    M_av = 0.0
    E2_av = 0.0
    for E in dos.keys():
        weight = math.exp(- E / T) * dos[E]
        Z += weight
        E_av += weight * E
        E2_av += weight * E ** 2
    E2_av /= Z
    E_av /= Z
    cv = (E2_av - E_av ** 2) / N / T ** 2
    cv_list.append(cv)
    #print(T, E_av / float(N), cv)
plt.scatter(list_T, cv_list)
plt.show()
```

### Algoritmo de muestreo local.

```
import random
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
L = 10
N = L * L
nbr = {i : ((i // L) * L + (i + 1) % L, (i + L) % N,
```

```

        (i // L) * L + (i - 1) % L, (i - L) % N) \
            for i in range(N)}

nsteps = 35000
list_T=[0.5+0.15*i for i in range(26)]

def energy(S, N, nbr):
    E = 0.0
    for k in range(N):
        E -= S[k] * sum(S[nn] for nn in nbr[k])
    return 0.5 * E #####Since pair of nodes are counted twice

cv_list=[]
for T in list_T:
    list_E=[]
    list_E2=[]
    S = [1 for k in range(N)]
    for step in range(nsteps):
        k = random.randint(0, N - 1)
        delta_E = 2.0 * S[k] * sum(S[nn] for nn in nbr[k])
        if np.random.uniform(0.0, 1.0) < np.exp(- delta_E/T):
            S[k] *= -1
        list_E.append(energy(S,N,nbr))
    cv_list.append(np.mean([x**2 for x in list_E])/N/T**2-(np.mean(list_E)**2
        )/N/T**2)

plt.scatter(list_T,cv_list)
plt.xlabel('Temperatura')
plt.ylabel('Calor espec\'ifico')
plt.show()

```

## Algoritmo de Wolff para el modelo de Ising en 2D.

### ■ Parte 1.

```

import random, numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd

L = 30
N = L * L
nbr = {i : ((i // L) * L + (i + 1) % L, (i + L) % N,
            (i // L) * L + (i - 1) % L, (i - L) % N)
        for i in range(N)}

e=1
h=0
T = [0.5 + 0.05 * i for i in range(60)]
nsteps = 7200
S = [1 for k in range(N)]

```

### ■ Parte 2.

```

def energy(S, N, nbr):
    E = 0.0
    for k in range(N):
        E -= e*S[k] * sum(S[nn] for nn in nbr[k]) + 2*h*S[k]
    return (0.5 * E)

def mag(S):
    mag=abs(np.sum(S))
    return(mag)

```

```

def clus(S):
    k=np.random.randint(0,N-1)
    Pocket, Cluster = [k], [k]
    while Pocket != []:
        j = np.random.choice(Pocket)
        for l in nbr[j]:
            if S[l] == S[j] and l not in Cluster and np.random.uniform(0.0, 1
                                .0) < p:
                Pocket.append(l)
                Cluster.append(l)
        Pocket.remove(j)
    for j in Cluster:
        S[j] *= -1
    return S

```

### ■ Parte 3.

```

list_cv=[]
list_meanmag=[]
list_meanenergy=[]
list_suscep=[]
for temp in T:
    p = 1.0 - np.exp(-2.0 / temp)
    l_energy=[]
    l_mag=[]
    l_sqreenergy=[]
    l_sqrmag=[]
    for step in range(nsteps):
        S=clus(S)
        l_energy.append(energy(S,N,nbr))
        l_mag.append(mag(S))
    mean_energy= np.mean(l_energy)
    mean_mag= np.mean(l_mag)
    suscep=(1/temp)*(np.mean([j**2 for j in l_mag])-mean_mag**2)/N
    c_v=(1/temp**2)*(np.mean([j**2 for j in l_energy])-mean_energy**2)/N
    list_cv.append(c_v)
    list_meanmag.append(mean_mag)
    list_meanenergy.append(mean_energy)
    list_suscep.append(suscep)

```

### ■ Parte 4.

```

dict={'Temp':T, 'c_v':list_cv, 'MagSusc':list_suscep}
df=pd.DataFrame(dict)
df.to_csv(r'C:\Users\GUSTAVO\Desktop\PY4E\GraphThesisLic\Final_Scripts\
        2d_cvsus_20.csv', index=False)

plt.subplot(2,1,1)
plt.scatter(T, list_cv, s=5)
plt.ylabel("Calor específico")
plt.legend([str(L)+'x'+str(L)])

plt.subplot(2,1,2)
plt.scatter(T, list_suscep, s=5)
plt.xlabel("Temperatura")
plt.ylabel("Susceptibilidad magnetica")
plt.savefig(r"C:\Users\GUSTAVO\Desktop\PY4E\GraphThesisLic\Final_Scripts\
        2d_cvsus_20.jpg")

plt.show()

```

## Modelo de Ising en 3D.

### ■ Red cristalina cúbica simple SC :

#### Algoritmo de Wolff.

Se muestra el fragmento del código que crea la red SC:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd

L = 8
N = L**3

def f(i):
    k=i-(i//L**2)*L**2
    return k

nbr={i: ((i//L**2)*L**2+(f(i)//L)*L + (f(i)+1)%L,(i//L**2)*L**2+(f(i)//L)*L +
        (f(i)-1)%L,
        (i//L**2)*L**2+((f(i)+L)%L**2), (i//L**2)*L**2+((f(i)-L)%L**2),
        (((i//L**2+1)%L)*L**2)+f(i), (((i//L**2-1)%L)*L**2)+f(i)) for i in
        range(N) }

T=[1+0.2*i for i in range(30)]
e=1
h=0
nsteps = 4000
S = [1 for k in range(N)]
```

El resto del código es idéntico al caso bidimensional.

#### Algoritmo de Swendsen y Wang.

initialisation\_3d.py

```
import numpy as np
from sys import exit

def assign_spin(self):
    if self.spin_init == 'random':
        grid_spins = np.random.rand(self.L, self.L, self.L) ###creates a 3D
                                                                array of random numbers (in [0
                                                                ,1])

        grid_spins[grid_spins >= 0.5] = 1
        grid_spins[grid_spins < 0.5] = -1

    elif self.spin_init == 'up':
        grid_spins = np.ones([self.L, self.L, self.L], dtype= int) ###creates
                                                                a 3D array of ones

    elif self.spin_init == 'down':
        grid_spins = -1*np.ones([self.L, self.L, self.L], dtype= int)

    return grid_spins

def grid_init(self):
    grid_x, grid_y, grid_z = [range(self.L), range(self.L), range(self.L)]
    grid_coordinates = np.meshgrid(grid_x, grid_y, grid_z) ###All possible
                                                                combinations of x,y,z coordinates
    grid_coordinates = np.reshape(grid_coordinates, (3,-1))
    spin_site_numbers = range(self.spin_site_total_number)
```

```

        return grid_coordinates, spin_site_numbers

def matrix_init(self):
    T_total = np.zeros([self.T_steps, 1])
    h_total = np.zeros([self.T_steps, 1])
    energy = np.zeros([self.T_steps, 1])
    chi = np.zeros([self.T_steps, 1])
    c_v = np.zeros([self.T_steps, 1])
    magnetisation = np.zeros([self.T_steps, 1])

    energy_i = np.zeros([self.MC_steps, 1])
    magnetisation_i = np.zeros([self.MC_steps, 1])
    chi_i = np.zeros([self.MC_steps, 1])

    size_large_clus_i = np.zeros([self.MC_steps, 1])
    size_large_clus = np.zeros([self.T_steps, 1])
    var_size = np.zeros([self.T_steps, 1])
    return (T_total, h_total, energy, chi, c_v, magnetisation, energy_i,
            magnetisation_i,
            chi_i, size_large_clus_i, size_large_clus, var_size)

```

### energies\_3d.py

```

import numpy as np

def spin_site_energy(self, spin_site_x, spin_site_y, spin_site_z, grid_spins):
    :
    spin_site_energy = 0
    spin_neighbour_x = (spin_site_x + np.array([1, 0, 0, -1, 0, 0]))%(self.L)
    spin_neighbour_y = (spin_site_y + np.array([0, -1, 0, 0, 1, 0]))%(self.L)
    spin_neighbour_z = (spin_site_z + np.array([0, 0, 1, 0, 0, -1]))%(self.L)
    for i in range(np.size(spin_neighbour_x)):
        spin_value_center = grid_spins[spin_site_x, spin_site_y, spin_site_z]
        spin_value_neighbour = grid_spins[spin_neighbour_x[i], spin_neighbour_y
                                           [i], spin_neighbour_z[i]]
        spin_site_energy += -self.J*spin_value_center*spin_value_neighbour -
                             self.h*spin_value_center

    return spin_site_energy

def system_energy(self, grid_coordinates, grid_spins, spin_site_numbers):
    sys_energy = 0
    for spin_site_number in spin_site_numbers:
        spin_site_x = grid_coordinates[0][spin_site_number]
        spin_site_y = grid_coordinates[1][spin_site_number]
        spin_site_z = grid_coordinates[2][spin_site_number]
        sys_energy += spin_site_energy(self, spin_site_x, spin_site_y,
                                         spin_site_z, grid_spins)

    sys_energy = sys_energy/2 # To counter double counting of the links

    return sys_energy

```

### quantities\_3d.py

```

import numpy as np
import numpy.random as rnd

```

```

def btstrp_rnd_gen(self):

    N = self.eq_data_points - 1
    a = np.round(np.random.random(self.bs_trials*N).reshape(self.bs_trials,N)
                  *N)

    return a.astype(int)

def m_calculate(self, magnetisation_i):
    mean_mag= np.mean(magnetisation_i)

    return mean_mag

def chi_calculate(self, magnetisation_i):
    data_eq = magnetisation_i
    chi=np.var(data_eq)/(self.T*self.kb*self.L**3)

    return chi

def c_v_calculate(self, energy_i):
    data_eq = energy_i
    c_v=np.var(data_eq)/((self.L**3)*(self.T**2)*(self.kb))

    return c_v

def var_size_large_clus(self, size_large_clus_i):
    var_size=np.var(size_large_clus_i/self.L**3)
    return var_size

```

#### swendsen\_wang\_3d.py

```

import numpy as np
import numpy.random as rnd

def SW_algorithm(self, grid_coordinates, spin_site_numbers, grid_spins):
    ###this code return islands using backtrack algorithm, new spin conf.(
    grid_spins), flip_cluster, etc

    islands = []
    cluster_flips = []
    not_visited = np.ones((self.L, self.L, self.L), dtype= bool)

    bonds = bond_eval(self, grid_spins)

    for i in spin_site_numbers:
        cluster = []
        flip_cluster = 2*rnd.randint(2) - 1
        spin_site_x = grid_coordinates[2][i]
        spin_site_y = grid_coordinates[1][i]
        spin_site_z = grid_coordinates[0][i]
        cluster, grid_spins = back_track(self, spin_site_x, spin_site_y,
                                          spin_site_z, bonds,
                                          not_visited, cluster,
                                          grid_spins, flip_cluster)

        if cluster != []:
            islands.append(cluster)
            cluster_flips.append(flip_cluster)

    return islands, grid_spins, cluster_flips

```

```

def bond_eval(self, grid_spins):
    bonds = np.zeros((3, self.L, self.L, self.L), dtype=float)
    chance_value = np.minimum(1, np.exp(-2*self.J/(self.kb*self.T)))

    delta_spin_x = np.abs(grid_spins+np.roll(grid_spins,-1,axis=2))/2 #
                                                                Divided by 2 to normalise
    nz_delta_spin_x = np.asarray(np.nonzero(delta_spin_x))

    delta_spin_y = np.abs(grid_spins+np.roll(grid_spins,-1,axis=1))/2
    nz_delta_spin_y = np.asarray(np.nonzero(delta_spin_y))

    delta_spin_z = np.abs(grid_spins+np.roll(grid_spins,-1,axis=0))/2
    nz_delta_spin_z = np.asarray(np.nonzero(delta_spin_z))

    for i in range(np.shape(nz_delta_spin_x)[1]):
        if rnd.binomial(1, chance_value) == 1:
            bonds[2, nz_delta_spin_x[0,i], nz_delta_spin_x[1,i],
                                                         nz_delta_spin_x[2,i]] = 0
        else:
            bonds[2, nz_delta_spin_x[0,i], nz_delta_spin_x[1,i],
                                                         nz_delta_spin_x[2,i]] = np
                                                         .inf

    for j in range(np.shape(nz_delta_spin_y)[1]):
        if rnd.binomial(1, chance_value) == 1:
            bonds[1, nz_delta_spin_y[0,j], nz_delta_spin_y[1,j],
                                                         nz_delta_spin_y[2,j]] = 0
        else:
            bonds[1, nz_delta_spin_y[0,j], nz_delta_spin_y[1,j],
                                                         nz_delta_spin_y[2,j]] = np
                                                         .inf

    for j in range(np.shape(nz_delta_spin_z)[1]):
        if rnd.binomial(1, chance_value) == 1:
            bonds[0, nz_delta_spin_z[0,j], nz_delta_spin_z[1,j],
                                                         nz_delta_spin_z[2,j]] = 0
        else:
            bonds[0, nz_delta_spin_z[0,j], nz_delta_spin_z[1,j],
                                                         nz_delta_spin_z[2,j]] = np
                                                         .inf

    return bonds

def back_track(self, x, y, z, bonds, not_visited, cluster, grid_spins,
               flip_cluster):
    ###This function constructs the islands or clusters

    if not_visited[z, y, x]:
        not_visited[z, y, x] = False
        cluster.append([z, y, x])
        grid_spins[z, y, x] = grid_spins[z, y, x] * flip_cluster

    if bonds[2][z][y][x] == np.inf: ###+x growth of cluster
        n_x = (x+1)%self.L
        n_y = y
        n_z = z
        cluster, grid_spins = back_track(self, n_x, n_y, n_z, bonds,
                                         not_visited, cluster,
                                         grid_spins, flip_cluster)

    if bonds[2][z][y][(x-1)%self.L] == np.inf: ###-x growth of cluster
        n_x = (x-1)%self.L
        n_y = y

```

```

        n_z = z
        cluster, grid_spins = back_track(self, n_x, n_y, n_z, bonds,
                                         not_visited, cluster,
                                         grid_spins, flip_cluster)

    if bonds[1][z][y][x] == np.inf:  ##+y growth of cluster
        n_x = x
        n_y = (y + 1)%self.L
        n_z = z
        cluster, grid_spins = back_track(self, n_x, n_y, n_z, bonds,
                                         not_visited, cluster,
                                         grid_spins, flip_cluster)

    if bonds[1][z][(y - 1)%self.L][x] == np.inf:  ##-y growth of cluster
        n_x = x
        n_y = (y - 1)%self.L
        n_z = z
        cluster, grid_spins = back_track(self, n_x, n_y, n_z, bonds,
                                         not_visited, cluster,
                                         grid_spins, flip_cluster)

    if bonds[0][z][y][x] == np.inf:  ##+z growth of cluster
        n_x = x
        n_y = y
        n_z = (z + 1)%self.L
        cluster, grid_spins = back_track(self, n_x, n_y, n_z, bonds,
                                         not_visited, cluster,
                                         grid_spins, flip_cluster)

    if bonds[0][(z - 1)%self.L][y][x] == np.inf:  ##-z growth of cluster
        n_x = x
        n_y = y
        n_z = (z - 1)%self.L
        cluster, grid_spins = back_track(self, n_x, n_y, n_z, bonds,
                                         not_visited, cluster,
                                         grid_spins, flip_cluster)

    return cluster, grid_spins

```

### ising\_simulation\_3d.py

```

import numpy as np
import numpy.random as rnd

from types import SimpleNamespace
from importlib import reload

from initialisation_3d import *
from energies_3d import *
from swendsen_wang_3d import *
from quantities_3d import *

def IM_sim(self):
    grid_spins = assign_spin(self)
    grid_coordinates, spin_site_numbers = grid_init(self)
    T_total, h_total, energy, chi, c_v, magnetisation, energy_i,
    magnetisation_i, chi_i,
    size_large_clus_i, size_large_clus,
    var_size = matrix_init(self)

    for j, temp in enumerate(range(self.T_steps)):

```

```

# Loop over different temperatures with interval dT
energy_ii = system_energy(self, grid_coordinates, grid_spins,
                           spin_site_numbers)

if self.algorithm == 'SF':
    # Regular metropolis algorithm, here called single spin flip.
    for i, t in enumerate(range(self.time_steps)):

        # Energy and magnetisation are stored every montecarlo time
        # step
        if t%self.MCS == 0:
            energy_i[int(i/self.MCS)] = energy_ii
            magnetisation_i[int(i/self.MCS)] = np.mean(grid_spins)

        grid_spins, energy_ii = spin_flip_random(self,
                                                  grid_coordinates,
                                                  grid_spins, energy_ii)

elif self.algorithm == 'SW':
    # Swendsen Wang algorithm.
    for i in range(self.MC_steps):#enumerate(range(self.MC_steps)):
        islands, grid_spins, cluster_flips = SW_algorithm(self,
                                                          grid_coordinates,
                                                          spin_site_numbers,
                                                          grid_spins)

        energy_i[i] = system_energy(self, grid_coordinates,
                                     grid_spins,
                                     spin_site_numbers)
        magnetisation_i[i] = np.abs(np.sum(grid_spins))

        size_large_clus_i[i] = max([len(islands[i]) for i in range(len
                                                                    (islands))])

    size_large_clus=np.mean(size_large_clus_i)

    magnetisation[j]= m_calculate(self, magnetisation_i)
    chi[j] = chi_calculate(self, magnetisation_i)#, btstrp_seq)
    c_v[j] = c_v_calculate(self, energy_i)
    var_size[j]=var_size_large_clus(self, size_large_clus_i)

    T_total[j] = self.T
    h_total[j] = self.h

    # Increment T and h
    self.T = self.T + self.dT
    self.h = self.h + self.dh

# Store simulation results
results = SimpleNamespace(temperature = T_total,
                           magnetic_field = h_total,
                           chi = chi,
                           energy = energy,
                           magnetisation = magnetisation,
                           c_v = c_v,
                           grid_spins = grid_spins,
                           grid_coordinates = grid_coordinates,
                           size_large_clus = size_large_clus,
                           var_size=var_size
                           )

if self.algorithm == 'SW':
    results.islands = islands

```

```
return results
```

sw\_wang\_finalscript\_3d.py

```
import time as tm
from types import SimpleNamespace
from ising_simulation_3d import *
import matplotlib.pyplot as plt

start_time = tm.time()

sim = SimpleNamespace(MC_steps = 1000,          # Number of monte carlo steps
                      eq_data_points = 1000, # Number of equilibrium data
                                                points in MC
                                                steps
                      L = 8,                   # Grid size in 1 dimension
                      T = 2.5,                 # Initial temperature
                      T_steps = 25,            # Number of temperature steps
                      dT = 0.15,               # Temperature increment
                      h = 0,                   # Initial magnetic field
                      dh = 0,                  # Magnetic increment
                      J = 1,                   # Coupling J (Keep at 1)
                      kb = 1,                  # Boltzman constant (Keep at 1)
                      spin_init = 'up',        # Initial spin grid (up, down or
                                                random)
                      algorithm = 'SW',        # SW (Swendesen Wang) or SF (Spin
                                                Flip)
                      bs_trials = 1000,        # Number of bootstrap trials,
                                                between 500-2000
                                                suffieces
                      )

sim.spin_site_total_number = sim.L**3          # Total number of spin sites
sim.MCS = sim.L**3                             # Montecarlo step size
sim.time_steps = sim.MCS * sim.MC_steps        # Montecarlo time to regular time
                                                steps

# Simulation results
results = IM_sim(sim)

end_time = tm.time()
total_time = end_time - start_time
results.sim_time = total_time
```

## ■ Red cristalina cúbica centrada en el cuerpo BCC

### Algoritmo de Wolff

Se exhibe el fragmento inicial del código, que construye la red requerida .

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd

L = 8
N = L**3

def p(i): #####it gives the plane of red nodes
    k=i//L**2
```

```

    return k

def f(i):
    k=i-(i//L**2)*L**2
    return k

nbr_rr={i: ((i//L**2)*L**2+(f(i)//L)*L + (f(i)+1)%L, (i//L**2)*L**2+(f(i)//L)*
            L + (f(i)-1)%L,
            (i//L**2)*L**2+((f(i)+L)%L**2), (i//L**2)*L**2+((f(i)-L)%L**2),
            (((i//L**2+1)%L)*L**2)+f(i), (((i//L**2-1)%L)*L**2)+f(i)) for i in
            range(N) }

nbr_rb={i: ( (p(i)%L)*L**2 + ((f(i)//L-1)%L)*L + (f(i)%L-1)%L + N, (p(i)%L)*
            *L**2 + (f(i)//L)*L + (f(i)%L-1)%L +
            N,
            (p(i)%L)*L**2 + (f(i)//L)*L + f(i)%L + N, (p(i)%L)*L**2 + ((f(i)
            //L-1)%L)*L + f(i)%L + N,
            ((p(i)-1)%L)*L**2 + ((f(i)//L-1)%L)*L + (f(i)%L-1)%L + N, ((p(i)-1)%
            L)*L**2 + (f(i)//L)*L + (f(i)
            )%L-1)%L + N,
            ((p(i)-1)%L)*L**2 + (f(i)//L)*L + f(i)%L + N, ((p(i)-1)%L)*L**2 + ((
            f(i)//L-1)%L)*L + f(i)%L + N
            ) for i in range(N)}

nbr_br={i: ( (p(i)%L)*L**2 + ((f(i)//L+1)%L)*L + (f(i)%L+1)%L, (p(i)%L)*L**
            2 + (f(i)//L)*L + (f(i)%L+1)%L,
            (p(i)%L)*L**2 + (f(i)//L)*L + f(i)%L, (p(i)%L)*L**2 + ((f(i)//L+
            1)%L)*L + f(i)%L,
            ((p(i)+1)%L)*L**2 + ((f(i)//L+1)%L)*L + (f(i)%L+1)%L, ((p(i)+1)%L)*L
            **2 + (f(i)//L)*L + (f(i)%L+
            1)%L,
            ((p(i)+1)%L)*L**2 + (f(i)//L)*L + f(i)%L, ((p(i)+1)%L)*L**2 + ((f(i)
            //L+1)%L)*L + f(i)%L
            ) for i in range(N,2*N)}

T= [4+0.2*i for i in range(25)]#T_1+T_2+T_3
e=.56
u=1
h=0

```

En segundo lugar se muestra la parte donde se definen la energía, magnetización y el mecanismo de construcción del clúster.

```

def energy(S_r,S_b, N, nbr_rr, nbr_rb, nbr_br):
    E = 0.0
    for k in range(2*N):
        if k in range(N):
            E -= e*S_r[k] * sum(S_r[nn] for nn in nbr_rr[k]) + u*S_r[k]*sum(
                S_b[nn-N] for nn in nbr_rb
                ) + 2*h*S_r[k]
        else:
            E -= u*S_b[k-N]*sum(S_r[nn] for nn in nbr_br[k]) + 2*h*S_b[k-N]
    return 0.5 * E

def mag(S):
    mag=abs(np.sum(S)/N)
    return(mag)

def clus(S):
    k=np.random.randint(0,2*N-1)
    Pocket, Cluster = [k], [k]

```

```

while Pocket != []:
    j = np.random.choice(Pocket)
    if j in range(N):
        for l in nbr_rr[j]:
            if S[l] == S[j] and l not in Cluster and np.random.uniform(0.
                0, 1.0) < p_1: ###
                remains different p
                for b-r and r-b edges

                Pocket.append(l)
                Cluster.append(l)
        for l in nbr_rb[j]:
            if S[l] == S[j] and l not in Cluster and np.random.uniform(0.
                0, 1.0) < p_2: ###
                remains different p
                for b-r and r-b edges

                Pocket.append(l)
                Cluster.append(l)

    if j in range(N, 2*N): ##blue node
        for l in nbr_br[j]:
            if S[l] == S[j] and l not in Cluster and np.random.uniform(0.
                0, 1.0) < p_2:

                Pocket.append(l)
                Cluster.append(l)
    Pocket.remove(j)
for j in Cluster:
    S[j] *= -1
return S

```

Se concluye mostrando el fragmento que calcula los observables para diversas temperaturas.

```

list_cv=[]
list_meanmag=[]
list_meanenergy=[]
list_suscep=[]
for temp in T:
    p_1=1.0 - np.exp(-2.0*e / temp)
    p_2=1.0 - np.exp(-2.0*u / temp)
    l_energy=[]
    l_mag=[]
    l_sqreenergy=[]
    l_sqrmag=[]
    for step in range(nsteps):
        S=clus(S)
        l_energy.append(energy(S[0:N],S[N:2*N],N, nbr_rr, nbr_rb, nbr_br))
        l_mag.append(mag(S))
    mean_energy= np.mean(l_energy)
    mean_mag= np.mean(l_mag)
    suscep=(1/temp)*(np.mean([j**2 for j in l_mag])-mean_mag**2)/N
    c_v=(1/temp**2)*(np.mean([j**2 for j in l_energy])-mean_energy**2)/N
    list_cv.append(c_v)
    list_meanmag.append(mean_mag)
    list_meanenergy.append(mean_energy)
    list_suscep.append(suscep)

```

## Ajuste de curvas.

### Ajuste en potencias.

```
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit
from matplotlib import pyplot as plt
import pandas as pd

df=pd.read_csv(r'C:\Users\GUSTAVO\Downloads\LATEX.BEAMER\Licenciatura\
                2d_cvsus_[2.34,2.88]_30x30_7200.csv')

T_c=2.32

def conv_temp(temp):
    return np.abs((T_c-temp)/T_c)

df['Temp_conv']=df['Temp'].apply(conv_temp)
T=df['Temp_conv']
c_v=df['c_v']

def power(x,a,b):
    return a*(x**b)

param, param_cov = curve_fit(power, T, c_v)

residuals = c_v- power(T, *param)
ss_res = np.sum(residuals**2)
ss_tot = np.sum((c_v-np.mean(c_v))**2)
r_squared = 1 - (ss_res / ss_tot)
print("R_squared")
print(r_squared)
print('power exponent')
print(param[1])

ans = (param[0]*(T**param[1]))
plt.plot(T, c_v, 'o', color='red', label="data")
plt.plot(T, ans, '--', color='blue', label="optimized data")
plt.xlabel("t")
plt.ylabel("Calor espec\`ifico")
plt.legend()
plt.show()
```

### Ajuste logarítmico.

```
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit
from matplotlib import pyplot as plt
import pandas as pd

df=pd.read_csv(r'C:\Users\GUSTAVO\Downloads\LATEX.BEAMER\Licenciatura\
                Global_data\2d_cvsus_[1.65,2.88]
                _30x30_7200.csv')

T_c=2.32

def conv_temp(temp):
    return np.abs((T_c-temp)/T_c)

df['Temp_conv']=df['Temp'].apply(conv_temp)
T=df['Temp_conv'][66:]
c_v=df['c_v'][66:]
```

```

def loga(x,a,b):
    return a * np.log(x)+b

param, param_cov = curve_fit(loga, T, c_v)

residuals = c_v- loga(T, *param)
ss_res = np.sum(residuals**2)
ss_tot = np.sum((c_v-np.mean(c_v))**2)
r_squared = 1 - (ss_res / ss_tot)
print("R_squared")
print(r_squared)
print('par\'ametro')
print(param[0], param[1])

ans = (param[0]*(np.log(T))+param[1])
plt.plot(T, c_v, 'o', color='red', label="data")
plt.plot(T, ans, '--', color='blue', label="optimized data")
plt.xlabel("t")
plt.ylabel("Calor espec\'ifico")
plt.title('logarithm fit')
plt.legend()
plt.show()

```