

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO**  
**ESCUELA DE POSGRADO**  
**UNIDAD DE POSGRADO DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA**  
**ELECTRICA Y ELECTRÓNICA**



“IMPLEMENTACIÓN DE LA SIMULACIÓN MONTECARLO BASADO EN EL MODELO ISING CON ENFOQUE EN LAS TRANSICIONES PARA OBTENER PARAMETROS DE PROPIEDADES MAGNETICAS EN MATERIALES FERROMAGNÉTICOS, CALLAO 2021”

**TESIS PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO EN INGENIERÍA ELÉCTRICA CON MENCIÓN EN GERENCIA DE PROYECTOS DE INGENIERÍA**

SALAZAR ESPINOZA, FERNANDO

CALLAO – 2021  
PERÚ



## HOJA DE REFERENCIA DE JURADO

### MIEMBROS DEL JURADO

- **Dr. ADAN ALMIRCAR TEJADA CABANILLAS:** **PRESIDENTE**
- **Dr. CÉSAR AUGUSTO SANTOS MEJÍA:** **SECRETARIO**
- **Mg. JESSICA ROSARIO MEZA ZAMATA:** **MIEMBRO**
- **Mg. ANTENOR LEVA APAZA:** **MIEMBRO**
- **Dr. Santiago Linder Rubiños Jiménez:** **ASESOR**

**N° DE LIBRO:** **01**

**FOLIO** **113**

**FECHA DE APROBACIÓN** : **30 de diciembre de 2021**

**RESOLUCIÓN DIRECTORAL** : **N° 069-2021-DUPFIEE**

## **DEDICATORIA**

### **A mis padres:**

Aristides y Enriqueta por el apoyo siempre en todo momento, además por sus sabios consejos.

### **A mi familia:**

Yesabella, Luciana, Máximo y Mafer.

## **AGRADECIMIENTO**

Agradecer a Dios y a la Virgen María por darme la fortaleza y perseverancia para siempre salir adelante.

A mi Amigo Juvenal Tordocillo por su apoyo, a mí asesor Santiago Rubiños y a mis profesores, colegas y amigos de la Universidad Nacional del Callao.

# Índice

<b>HOJA DE REFERENCIA DE JURADO Y APROBACIÓN .....</b>	<b>4</b>
<b>DEDICATORIA .....</b>	<b>5</b>
<b>AGRADECIMIENTO.....</b>	<b>6</b>
<b>RESUMEN.....</b>	<b>11</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>12</b>
<b>I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....</b>	<b>15</b>
1.1 Identificación del Problema .....	15
1.2 Formulación del Problema.....	17
Problema Principal.....	17
Problemas Específicos.....	17
1.3 Objetivos de la Investigación .....	17
Objetivo General.....	18
Objetivos Específicos .....	18
1.4 Justificación.....	18
1.5 Limitaciones y Facilidades.....	19
<b>II. MARCO TEÓRICO .....</b>	<b>20</b>
2.1 Antecedentes del Estudio .....	20
2.2 Marco Teórico Conceptual.....	21
Transiciones de fase y fenómenos críticos.....	22
Propiedades macroscópicas de un sistema.....	28
El Ferromagnetismo e importancia.....	30
El Magnetismo y el modelo ISING.....	37
<b>III. VARIABLES E HIPÓTESIS .....</b>	<b>41</b>
3.1 Definición de las variables .....	41
3.2 Operacionalización de las variables.....	41
3.3 Hipótesis general e hipótesis específicas.....	42
Hipótesis General .....	42
Hipótesis Específicos.....	42
<b>IV. DISEÑO METODOLOGICO.....</b>	<b>43</b>
4.1 Tipo de Investigación.....	43
4.2 Diseños de la Investigación .....	43
4.3 Población y Muestra.....	43
4.4 Técnicas e Instrumentos de Recolección de Datos.....	44

4.5	Procedimiento de Recolección de Datos .....	44
4.6	Procedimiento metodológico de la obtención de datos.....	44
<b>V.</b>	<b>RESULTADOS.....</b>	<b>47</b>
5.1	Resultados.....	47
	Teoría del Campo Medio.....	47
5.2	El método Monte Carlo.....	51
	Generación de Números aleatorios.....	52
	5.2.2 Algoritmo de Metrópolis para el Método Montecarlo.....	56
	5.2.3 Resultados mediante el método Monte Carlo .....	60
<b>VI.</b>	<b>DISCUSIÓN DE RESULTADOS .....</b>	<b>65</b>
6.1	Contrastación de hipótesis con los resultados.....	65
<b>VII.</b>	<b>CONCLUSIONES.....</b>	<b>71</b>
<b>VIII.</b>	<b>RECOMENDACIONES .....</b>	<b>72</b>
<b>IX.</b>	<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>73</b>
<b>ANEXOS.....</b>		<b>75</b>
	ANEXO N° 1.....	75
	ANEXO N° 2.....	77
	ANEXO 2.0: MAGNETIZACIÓN EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA EN FORTRAN .....	77
	ANEXO 2.1: GENERADOR INTRINSECO DE LAS LIBRERIAS DE FORTRAN.....	79
	ANEXO 2.2: GENERADOR RANO DE LAS RECETAS NUMERICA DE FORTRAN 77.....	80
	ANEXO 2.3: GENERADOR Según MERSENNE TWISTER .....	81
	ANEXO 2.4: PROGRAMA MONTECARLO DEL MODELO ISING EN 2D .....	83

## ÍNDICE DE FIGURAS

1	Figura 2.1	23
2	Figura 2.2	24
3	Figura 2.3	25
4	Figura 2.4	26
5	Figura 2.5	31
6	Figura 2.6	32
7	Figura 2.7	33
8	Figura 2.8	35
9	Figura 2.9	36
10	Figura 2.10	37
11	Figura 5.1	50
12	Figura 5.2	51
13	Figura 5.3	53
14	Figura 5.4	55
15	Figura 5.5	56
16	Figura 5.7	58
17	Figura 5.8	59
18	Figura 5.9	60
19	Figura 5.10	61
20	Figura 5.11	62
21	Figura 5.12	63
22	Figura 5.13	63
23	Figura 6.1	66
24	Figura 6.2	67
25	Figura 6.3	67
26	Figura 6.4	68
27	Figura 6.5	69



## ÍNDICE DE TABLAS

1	Tabla 2.1 .....	27
2	Tabla 2.2 .....	34
3	Tabla 6.1 .....	69

# RESUMEN

Siendo una de las más importantes propiedades en materiales ferromagnéticos, es la pérdida de magnéticidad, debido a los cambios de temperatura o su efecto al estar sometidos a campos externos, siendo desde el punto de vista teórico complejo, y dado que el método Monte Carlo, es un método basado en la ley de grandes números y hace propiedades probabilísticas que permite aproximar el comportamiento de las transiciones de fase.

La implantación del algoritmo planteado de la simulación está basada en el Modelo Ising en dos dimensiones y se elaboró en FORTRAN 90, lo cual permita obtener los parámetros, magnetización, capacidad calorífica, susceptibilidad magnética y la elaboración diversos diagramas de fase en situaciones ideales, como el incremento de temperatura el cual afecta la magnetización permitiendo comprender el comportamiento en distintas fases.

**Palabras clave:** Modelo Ising, Montecarlo de Metrópolis, Ferromagnetismo.

# RIPRENDERE

Essendo una delle proprietà più importanti nei materiali ferromagnetici, è la perdita di magnetità, dovuta alle variazioni di temperatura o al suo effetto quando sottoposti a campi esterni, essendo complessa dal punto di vista teorico, e dato che il metodo Monte Carlo, è un metodo basato sulla legge dei grandi numeri e realizza proprietà probabilistiche che consentono di approssimare il comportamento delle transizioni di fase.

L'implementazione dell'algoritmo di simulazione proposto si basa sul Modello Ising in due dimensioni ed è stato sviluppato in FORTRAN 90, che consente di ottenere i parametri, la magnetizzazione, la capacità termica, la suscettività magnetica e lo sviluppo di vari diagrammi di fase in situazioni ideali, come il aumento della temperatura che influisce sulla magnetizzazione permettendo di comprendere il comportamento nelle diverse fasi.

**Parole chiave:** Modello Ising, Montecarlo de Metropolis, Ferromagnetismo

# INTRODUCCION

En la presente tesis titulada, “Implementación de una Simulación Montecarlo basado en el modelo Ising con enfoque en las transiciones de fase en materiales ferromagnéticos”, este estudio está motivada debido al comportamiento de los materiales ferromagnetismo dado que el estudio teórico es muy complejo por ello, los modelos simplificados son capaces de representar ciertos comportamientos tales como el modelo Ising y de Heisenberg, lo cual permiten analizar la termodinámica del ferromagnetismo ideal y simular transiciones de fase. Pero pese a la idealización del sistema con estos modelos la solución analítica de los mismos es imposible para más de dos dimensiones y ello lleva a la necesidad de buscar diferentes aproximaciones teóricas para poder aplicarlo, entre los cuales resaltan la teoría del campo medio, y otros más rigurosos pero aun así, resulta incompatible con resultados experimentales, en ese contexto, el método Montecarlo tiene mayor precisión y compatible con resultados experimentales, tal que el método Montecarlo está basado, en la ley de los grandes números, y otras variantes como el método Montecarlo de metrópolis, permite generar estado de configuraciones aleatorias que sigan la distribución del ensamble, entiéndase que el ensamble que usamos es el canónico, de forma que para valores fijos de temperatura y campo externo, podemos calcular de manera única en equilibrio, los valores de las demás cantidades como la magnetización, capacidad calorífica, susceptibilidad magnética y construir sus respectivos diagramas de fase se puede encontrar transiciones de fase, y los cálculos de temperatura crítica y los principales exponentes críticos para ser comparados con las otras aproximaciones teóricas.

Este estudio está centrado en elaborar un programa que permite simular para diferentes condiciones la estructura del trabajo de investigación, está conformada por los siguientes ítems:

**PLANTEAMIENTO DE LA INVESTIGACIÓN:** Esta sección se refiere al planteamiento del problema, en la cual está incluida la realidad problemática, seguidamente de la formulación del problema, objetivos de la investigación, justificación de la investigación.

**MARCO TEÓRICO:** Esta sección señala el marco teórico conceptual la cual incluye los antecedentes de la investigación a nivel internacional, nacional y otras publicaciones, las bases teóricas que sustentan el proceso de simulación de algoritmos y la elaboración del programa.

**VARIABLES E HIPÓTESIS:** Esta sección señala la definición de variables, su operacionalización y planteamiento de la hipótesis del trabajo de investigación.

**METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN:** Esta sección trata la metodología de estudio, la cual incluye el diseño metodológico, métodos de investigación, técnica de recolección de datos y técnicas para el procesamiento de la información.

**RESULTADOS DE LA INVESTIGACIÓN:** Esta sección consigna a los resultados de la investigación, se presenta los resultados por cuadros y gráficos de las variables física en estudio, lo cual es obtenido del programa elaborado.

**DISCUSIÓN DE RESULTADOS:** Esta sección se sustenta luego de haber realizado el análisis correspondiente de los resultados obtenidos en la investigación, con otros estudios similares.

**CONCLUSIONES:** Esta sección señala las conclusiones obtenidas según el objetivo planteado y las hipótesis del estudio.

**RECOMENDACIONES:** Esta sección se plantea recomendaciones para realizar estudios posteriores mediante el uso del algoritmo y los programas en casos reales y compatibilizar con estudios experimentales.

Finalmente, en la parte final del trabajo de investigación se encuentran los anexos, los programas realizados para estudio en lenguaje de programación científicos FORTRAN.

# I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

## 1.1 Identificación del Problema

El estudio teórico del ferromagnetismo es muy complejo y por ello se han construido diferentes modelos simplificados capaces de reproducir el fenómeno, siendo los más famosos los de Ising y Heisenberg, que permiten analizar la termodinámica a diferentes condiciones de un material ferromagnético ideal y simular transiciones de fase. Sin embargo, pese a haber idealizado el sistema con estos modelos, la solución analítica de los mismos es imposible para más de 2 dimensiones y ello ha llevado a la necesidad de realizar diferentes aproximaciones teóricas para poder aplicarlos, entre las cuales resaltan la teoría de campo medio, la teoría de Landau, aproximaciones de Bragg-Williams y de Bethe-Peierls y la rigurosa teoría de grupo de renormalización.

Aunque el magnetismo en materia condensada ha atraído la atención de muchos investigadores en el campo de los materiales, su comprensión es todavía incipiente que requiere elementos de los diversos campos de la física actual.

Dentro de la caracterización de las propiedades termodinámicas de los materiales magnéticos moleculares, se requiere sofisticados métodos de la física estadística y del magnetismo molecular. El magnetismo de superficies ha tomado una gran importancia, debido a sus relevantes aplicaciones tecnológicas en diferentes campos de la vida cotidiana. Tales, por ejemplo, los sustratos anti ferromagnéticos son importantes en los sensores magnéticos, ya que aseguran el endurecimiento magnético de una de las capas ferromagnéticas del sensor.

El interés es de vital importancia, tanto teórica como experimental, de los materiales magnéticos moleculares, ha crecido notablemente en las últimas tres décadas, debido a que pueden mostrar, tales como, histéresis magnética en todo el volumen, y por el otro, presentar diversos efectos importantes efectos desde el enfoque cuántico. Por otro lado, comparados con los metales clásicos y los óxido-metales, los magnetos moleculares tienen la gran ventaja es que pueden obtener a través de una selección apropiada de fuentes de espín, estos como iones en los metales de transición y radicales orgánicos (**Baglieto, 2011**). También las

múltiples aplicaciones tecnológicas, las cuales se sustentan en fenómenos tales como el ordenamiento magnético a temperatura ambiente, momentos magnéticos espontáneos, y la aparición de temperaturas de compensación. Esta propiedad, asociada permite el incremento de la coercitividad, permite la formación a nivel atómico pequeños dominios magnéticos estables, situación que tiene en la aplicación en la escritura y borrado de memorias magnetoópticas.

Dentro de la simulación y el estudio numérico, mediante modelos de Ising de espines mixtos, y de diversos magnetos moleculares, se han convertido en una importante herramienta teórica para su análisis y comprensión (**Creutz, 1983**). Es considerar que inicialmente los sistemas del modelo de Ising de espines mixtos se estudiaron principalmente por curiosidad teórica, en la actualidad dada la ventaja y que permite entender de forma adecuada el comportamiento se plantean diversas variantes que permite un excelente “laboratorio” y la comprensión de las propiedades termomagnéticas de algunos materiales moleculares magnéticos. En los últimos años no solo se han estudiado sistemas ferromagnéticos, sino que también permitió se han caracterizado las propiedades magnéticas de sistemas ferromagnéticos orgánicos (**Nakamura y Tucker, 2002**), los cuales se han sintetizado satisfactoriamente, aunque sigue abierta la posibilidad de seguir analizando el mecanismo del ferromagnetismo en estos materiales dado en el futuro puede permitir encontrar otras aplicaciones relevantes en la tecnología.

Debido a que el estudio desde el nivel teórico es necesario muchas aproximaciones dado que los efectos causados por los momentos dipolares a nivel interatómico pero estos efectos se manifiestan a nivel macroscópico y se recurre a matemáticas muy complicadas para llegar alguna aproximación válida y resulta incompatible con resultados experimentales y por ello se recurre al método Monte Carlo, que engloba un conjunto de procedimientos de orden probabilístico y que tiene como objetivo establecer a partir de la aleatoriedad mecanismos que permiten con gran certeza aproximar y observar el comportamiento de los parámetros físicos de orden predictivo, así como, resultados que son cercanos a los obtenidos en el laboratorio.

El método Montecarlo tiene mayor precisión cuando en los sistemas son aplicables el teorema estadístico de la Ley de grandes números. El método Monte Carlo Metrópolis permite generar estados o configuraciones aleatorias que sigan la distribución del ensamble canónico compatible con la física estadística en la termodinámica.

## 1.2 Formulación del Problema

En base a la necesidad de tener un algoritmo eficiente que permita encontrar parámetros termodinámicos relevantes y comportamientos bajo diferentes situaciones, surgen interrogantes que permite formular el problema general y problemas específicos.

### Problema Principal

PG: ¿Es posible implementar una simulación Montecarlo basado en el modelo Ising que permita obtener transiciones de fase en materiales ferromagnéticos?

### Problemas Específicos

PE1: ¿Es posible obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el **comportamiento de la Magnetización** en función de la temperatura?

PE2: ¿Es posible obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el **comportamiento del calor específico** en función de la temperatura?

PE3: ¿Es posible obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el **comportamiento de la susceptibilidad magnética** en función de la temperatura?

PE4: ¿Es posible obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el **comportamiento de la energía media** en función de la temperatura?

## 1.3 Objetivos de la Investigación

Los objetivos planteados en esta investigación comprenden de un objetivo general y objetivos específicos, que tiene como esencia implementar con el método Montecarlo basado en el modelo Ising, y su implementación es FORTRAN 90. Por tanto, los objetivos de la investigación quedan resumidos en los siguientes puntos:



## **Objetivo General**

**OG:** Implementar una simulación Montecarlo basado en el modelo Ising que permita obtener los parámetros de las propiedades magnéticas en materiales ferromagnéticos.

## **Objetivos Específicos**

**OE1:** Determinar por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la Magnetización en función de la temperatura.

**OE2:** Determinar por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento del calor específico en función de la temperatura.

**OE3:** Determinar por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura.

**OE4:** Determinar por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la energía media en función de la temperatura.

## **1.4 Justificación**

El Presente proyecto de investigación se justifica a base de los siguientes argumentos:

- **Justificación Teórica**

Se realiza, esta investigación y tiene el propósito de aportar al conocimiento ya existente y el modelo Ising es un modelo que permite explicar el proceso ferromagnético, y las transiciones de fase del comportamiento magnético de los materiales y este estudio es importante dado que hay materiales que se pueden perder su capacidad magnética para ciertas temperaturas.

- **Justificación Práctica**

Se justifica desde el punto de vista práctico, por el uso del método Montecarlo, y es un método basado en comportamiento probabilísticos y que a mayor ciclo iterativo permite que los datos en promedio se aproximan al valor real para lo cual se implementa un algoritmo en FORTRAN con la finalidad de comparar los resultados teóricos, obtenido mediante la simulación y probando de esta manera su eficiencia.

- **Justificación Tecnológica**

Desde el punto de vista tecnológico, permita predecir mediante simulación el comportamiento magnético de ciertos materiales ferromagnéticos y estos materiales son básicos en generadores eléctricos y motores.

## 1.5 Limitaciones y Facilidades

**Teórica:** Si bien se utiliza las teorías que involucran al modelo Ising y las propiedades termodinámicas desde el enfoque de la mecánica estadística, dado que es difícil de aproximar mediante medios analíticos por ello se recurre a la implementación de la simulación del método Montecarlo, la limitante se encuentra en que la simulación se realiza mediante situaciones ideales.

**Temporal:** El tiempo de simulación para cada proceso es 6 a 8 horas, para una máquina de 12 GB, memoria RAM y teniendo en cuenta que el método Montecarlo el error se reduce a la raíz del inverso del número de iteraciones.

**Espacial:** En cuanto al tamaño de la celda se ha utilizado a una matriz 40x40, realizando iteraciones suficientemente grandes para realizar las orientaciones aleatorias de las matrices.

**Facilidades:** Para el desarrollo de la investigación se contó con el tiempo necesario, los recursos económicos, la tecnología limitada siendo con un ordenador portátil propia por la pandemia.

**Limitaciones:** Las limitantes de la presente investigación fueron debido al estado de emergencia por lo que se coordinó con personas involucradas en el tema y el asesor vía virtual.

## II. MARCO TEÓRICO

### 2.1 Antecedentes del Estudio

Si bien sabemos un material ferromagnético tiene propiedades magnéticas y al acercarse a una fuente magnética, dicho material se comporta como imán debido a la alineación de los momentos magnéticos a nivel microscópicos y por tanto para explicar de forma conveniente **(Brooks-Bartlett Marion,2015)**.

El estudio teórico del ferromagnetismo es muy complejo y por ello se han construido modelos simplificados capaces de capturar la física esencial del problema, siendo los más famosos los de Ising y Heisenberg, que permiten analizar la termodinámica de un ferromagnético ideal y simular transiciones de fase. Sin embargo, pese a haber idealizado el sistema con estos modelos, la solución analítica de los mismos es imposible para más de 2 dimensiones y ello ha conllevado a la necesidad de realizar diferentes aproximaciones teóricas para poder aplicarlos, entre las cuales resaltan la teoría de campo medio **(Kobe,2000)**.

Un modelo físico sobre una red de espines es el modelo de Ising, fue propuesto por Wilhelm Lenz en 1960 para explicar el fenómeno de magnetización espontánea presente en materiales ferromagnéticos **(Kobe,2000)**. Estos materiales presentan magnetización en temperaturas menores a una temperatura crítica, inclusive con campo externo nulo, mostrando una transición de un estado ordenado a otro desordenado, donde el parámetro de orden es la magnetización. El modelo de Ising bidimensional presenta transición de fase a una temperatura distinta de cero, permitiendo comprender varios aspectos de los fenómenos de transición **(Gelover Santiago, 2005)**. En el modelo unidimensional la situación es distinta ya que no existe transición de fase a una temperatura mayor que cero.

Dado que la interacción entre espines afecta ciertos comportamientos colectivos del sistema, por ejemplo, en un sistema bidimensional de espines que no interactúan entre sí, no existe transición de un estado ferromagnético a uno paramagnético; sin embargo, usando el modelo de Ising se encuentra que el sistema presenta transición de fase. Este hecho manifiesta la importancia de la presencia de las interacciones y se espera que los parámetros físicos termodinámicos permitan cuantificar en la red de interacciones influya en la transición de fase.

Por otro lado, conociendo que el modelo de Ising en una dimensión no presenta transición de fase y en una red en dos dimensiones. El modelo de Ising es uno de los modelos más importantes de la mecánica estadística y ha sido utilizado para modelar fenómenos naturales presentes en otros campos como las ciencias sociales, la biología, la computación y muchos otros (**Morón y Mora,2003**).

Algunos estudios teóricos y simulaciones computacionales han sido efectuados con el propósito de describir el modelo de Ising sobre redes de mundo pequeño. **Zegarra Borrero y Loro Ramirez, (2013)**, estudiaron teóricamente el modelo de Ising sobre una red generada a partir de una red unidimensional, ellos encontraron que la red presenta transición de fase tipo campo medio, evidenciando que las reconexiones inducen una transición de fase que en la red unidimensional no existe.

Dado que los resultados teóricos predicen transiciones de fase y permiten calcular temperaturas de transición y exponentes críticos, poseen un error involucrado que generalmente resulta incompatible con resultados experimentales y por ello resulta necesario recurrir al método Monte Carlo, que tiene mayor precisión debido a que se fundamenta en el teorema estadístico de la Ley de grandes números. El método Monte Carlo Metrópolis permite generar estados o configuraciones aleatorias que sigan la distribución del ensamble de forma que para valores fijos de temperatura ( $T$ ) y campo externo ( $H$ ) podamos calcular de manera los valores de las demás cantidades de interés (magnetización  $M$ , capacidad calorífica  $C_H$  y susceptibilidad magnética  $\chi_T$ ) y construir sus respectivos diagramas de fase.

A partir de estos diagramas de fase se puede encontrar transición de fase, calcular la temperatura crítica y los principales exponentes críticos para ser comparados con los de otras aproximaciones teóricas.

## **2.2 Marco Teórico Conceptual**

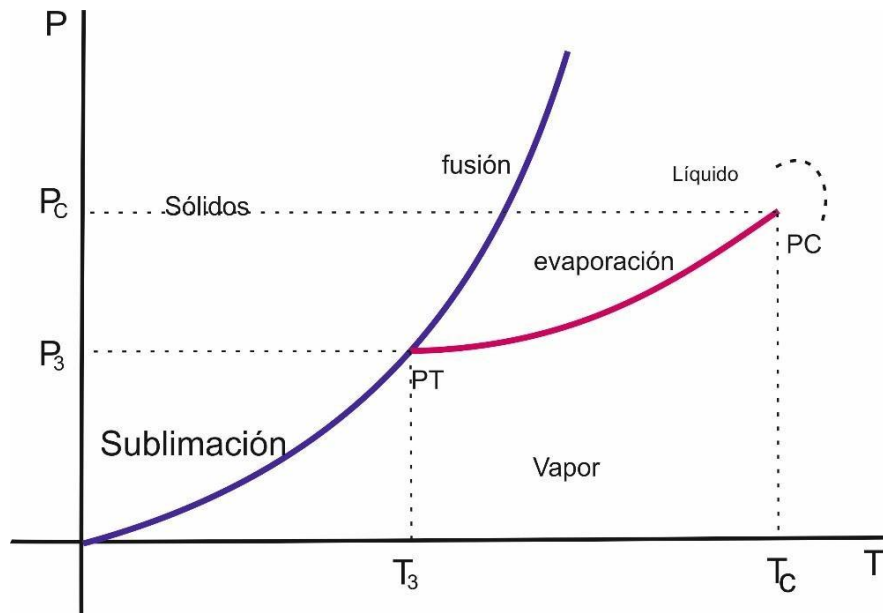
En esta sección se analiza los enfoques teóricos que está involucrado este estudio para su sustento científico.

## Transiciones de fase y fenómenos críticos

Las sustancias pueden hallarse en una gran variedad de estados, cada uno de los cuales está caracterizado por los valores de sus variables termodinámicas. Cada estado presenta ciertas propiedades macroscópicas que se conservan al evolucionar las variables termodinámicas, pero existen intervalos muy estrechos de estas variables en los que el sistema cambia notablemente sus propiedades, se dice entonces que el sistema experimenta una transición de fase. Los ejemplos más familiares de transiciones de fase los constituyen las transiciones líquido-gas, sólido-gas y sólido-líquido de un fluido clásico (**Rubio Puzzo y Saracco, 2011**).

Físicamente, una transición de fase se corresponde con un cambio drástico (es decir es un comportamiento brusco de cambio), en algunas propiedades del sistema al variar uno de sus parámetros, como la temperatura. Un caso bien conocido son los cambios entre estados de agregación de la materia: sólido, líquido y gaseoso. Por ejemplo, el agua se encuentra en forma de hielo por debajo de  $0^{\circ}\text{C}$  y en forma de vapor para  $100^{\circ}\text{C}$  y la fase líquida es un rango intermedio. Otro de los fenómenos muy estudiados es la magnetización, tal que algunos metales en principio sin ningún tipo de ordenamiento magnético pueden presentar magnetización no nula por debajo de cierta temperatura crítica, también conocido como la temperatura Curie, incluso en ausencia del campo magnético externo (**Rubio Puzzo y Saracco, 2011**). El efecto reside en el origen cuántico denominado interacción de intercambio que está relacionado con el solapamiento de la función de onda de los electrones.

Por otro lado, existe una gran variedad de transiciones de fase, tales, como son las ferromagnéticas, ferroeléctricas, fluido-superfluido y conductor-superconductor, entre otras. Las primeras teorías que surgieron en el estudio de las transiciones de fase son las llamadas clásicas o de campo medio, como la teoría de van der Waals de las transiciones de fase líquido-gas (1873), la teoría de Landau de las transiciones de fase que él denomina continuas (1937) y la teoría de Curie-Weiss de las transiciones de fase magnéticas (1948) (**Kobe, 2000**).



**1** **Figura 2.1**

Diagrama de fases correspondiente a un fluido. Además de las curvas de coexistencia entre las fases, se muestra el punto triple (PT), que es el único punto en donde coexisten las tres fases, y el punto crítico (P<sub>c</sub>), que es el punto terminal de la curva de coexistencia líquido-gas. (T<sub>3</sub>, P<sub>3</sub>) son los valores de la Temperatura y la Presión en el punto triple y (T<sub>c</sub>, P<sub>c</sub>) los valores de estas mismas variables correspondientes al punto crítico. **Elaboración propia.**

Consideremos, el ejemplo de un fluido, cuyo diagrama de fases se muestra en la **Figura 2.1**, el líquido se evapora, a lo largo de la curva de coexistencia líquido-gas se observan dos comportamientos termodinámicos distintos. En todos los puntos de la curva, excepto en el punto terminal que se conoce como punto crítico, se observan simultáneamente un calor latente, así como una discontinuidad en la densidad (**De la Espriella et al.,2012**). En el punto crítico, por el contrario, se pasa continuamente de la fase líquida a la fase gaseosa y no se observa un calor latente ni una discontinuidad en la densidad. En el caso de la transición de fase sólido-líquido la curva de coexistencia no exhibe un punto terminal y la transición siempre se presenta con un calor latente. Entonces, desde el punto de vista termodinámico, es posible distinguir dos tipos de transiciones de fase: aquellas que se presentan con un calor latente y aquellas en las que éste no se observa.

De lo visto, del comportamiento de la **Figura 2.1**, es importante señalar que, si bien la clasificación de Ehrenfest de las transiciones de fase tiene el gran mérito de revelar las similitudes existentes entre fenómenos tan diferentes como el magnetismo, el ferroelectricidad, la superconductividad y la transición líquido-vapor en el punto crítico, ésta no es correcta (**Guisoni et al., 2011**).

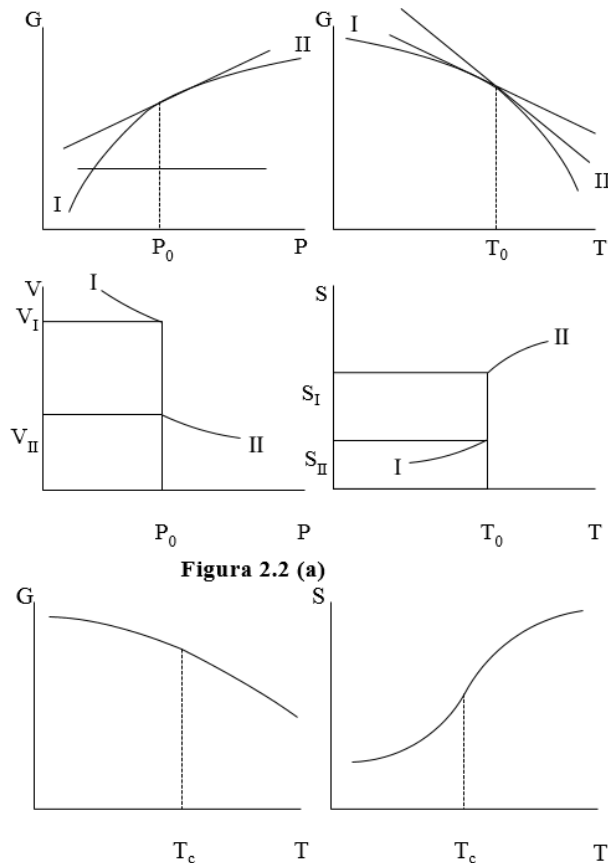


Figura 2.2 (b)

2

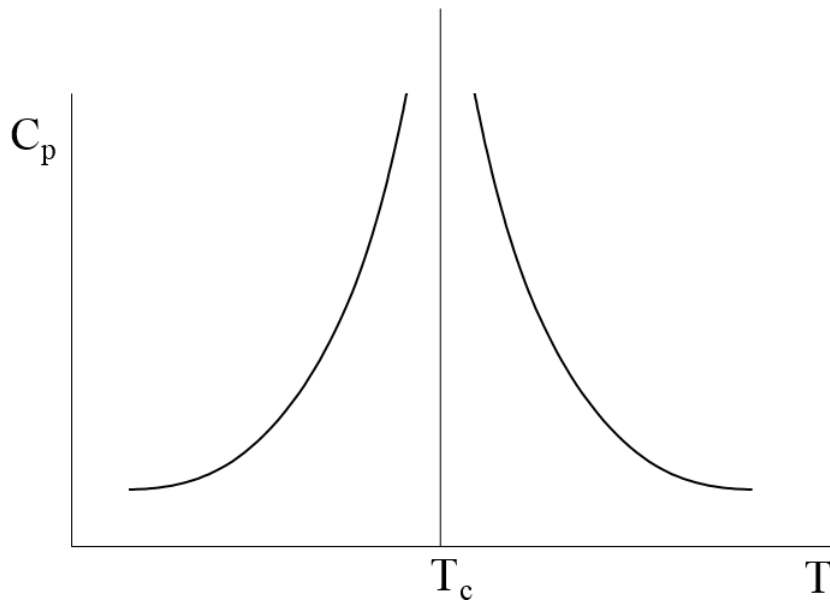
## Figura 2.2

**Figura 2.2.** (a) Para una transición de fase de primer orden, el potencial de Gibbs,  $G$ , es continuo pero las primeras derivadas, tales como  $V$  y  $S$  son discontinuas. (b) Para una transición de fase de segundo orden, tanto el potencial de Gibbs como sus primeras derivadas son (**Guisoni et al., 2011**).

También, tener en cuenta como la entropía, el volumen, la temperatura, la presión y la entalpía. En la transición de fase estas cantidades, correspondientes a derivadas de primer orden del

potencial de Gibbs, son discontinuas (**Guisoni et al., 2011**). En particular, el calor latente está asociado con una discontinuidad en la entropía. Por otra parte, son transiciones de fase de segundo orden aquellas para las cuales, los potenciales termodinámicos, así como sus derivadas de primer orden son continuos, mientras que alguna de sus derivadas de segundo orden es discontinua en el punto de transición, ver **Figura 2.2 (a) y (b)**.

De acuerdo con esta clasificación, en la transición de fase ferromagnética debería observarse una discontinuidad finita en la capacidad calorífica. En un ferromagneto real, la capacidad calorífica diverge hacia infinito, ver **Figura 2.3**



3

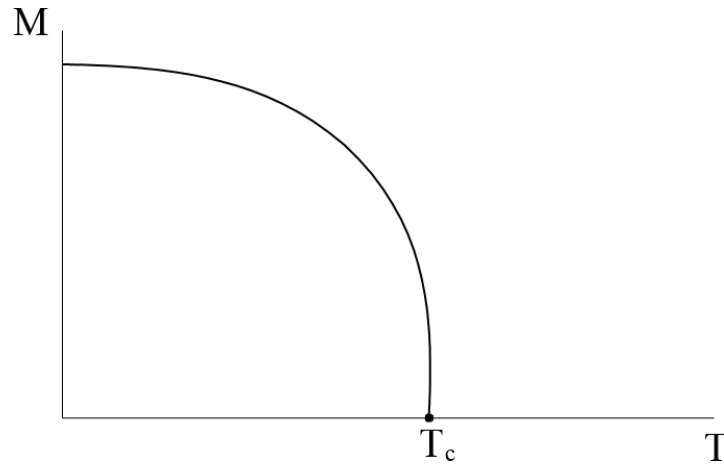
### Figura 2.3

**Figura 2.3.** Para la transición de fase ferromagnética las primeras derivadas de potencial de Gibbs,  $G$ , son continuas pero algunas derivadas de segundo orden, por ejemplo el calor específico a campo magnético constante,  $C_H$ , divergen.

Tal, es así como, en 1937, L. D. Landau observó que una transición de fase sin calor latente está acompañada de un cambio de simetría del sistema. La transición líquido-vapor en el punto crítico, es una excepción a este comportamiento. Para entender mejor el concepto de simetría, consideremos el caso de un material magnético, el cual a temperaturas altas y en ausencia de campo magnético externo no exhibe una magnetización permanente mientras



que por abajo de la llamada temperatura de Curie si la exhibe, ver **Figura 2.4**. En este caso, la transición tiene lugar precisamente en la temperatura de Curie y está acompañada por una reducción de simetría del sistema, pues por debajo de



4

**Figura 2.4**

**Figura 2.4** Magnetización como función de la temperatura, en ausencia de campo magnético externo. Por arriba de la temperatura de Curie,  $T_c$ , la magnetización es cero.

Según la **Figura 2.4**, la temperatura llega un momento en el que las fluctuaciones térmicas son tan fuertes que se anula el efecto, desapareciendo la magnetización. Habiendo dos clases de transición, lo que se llama de primer orden, (discontinua), que se observa un salto en la primera derivada del potencial termodinámico. Y del segundo orden (continua), aunque todas las funciones termodinámicas son continuas, se observa un salto o divergencia en la segunda derivada, siendo el caso de las transiciones ferromagnéticas y paramagnéticas (**Morgado, 2016**).

En cuanto a los parámetros de orden es la magnetización, mientras que para un sistema ferroeléctrico es la polarización eléctrica. En términos del parámetro de orden, se pueden distinguir dos tipos de transiciones de fase. Por una parte, transiciones para las que el parámetro de orden es discontinuo en el punto de transición y por otra, transiciones para las que el parámetro de orden tiende a cero continuamente cuando la temperatura aumenta hacia la temperatura de transición. Las transiciones de fase sólido-líquido y líquido-vapor (excepto en el punto crítico) de un fluido, son ejemplos de transiciones dentro del primer grupo, las cuales,

en una nomenclatura más moderna se conocen como transiciones de fase discontinuas. En el segundo grupo se encuentran transiciones de fase tales como la fluido-superfluido, la ferromagnética y la transición líquido-vapor de un fluido, en el punto crítico. Estas transiciones son generalmente conocidas como transiciones de fase críticas o continuas por lo que los correspondientes puntos de transición se conocen como puntos críticos (**Guisoni et al., 2011**). Un punto crítico de lo mencionado, en los párrafos anteriores, el punto crítico juega un papel fundamental en la teoría de las transiciones de fase, por lo que es muy importante tener en cuenta las características del sistema en ese punto.

**Tabla 2.1** Definición de los exponentes críticos para un ferromagnéticos. (**Guisoni et al., 2011**).

Exp.	Definición	Condiciones			Cantidad que caracteriza
		$\varepsilon$	$H$	$M$	
$\alpha$	$C \sim (\varepsilon)^{-\alpha}$	$> 0$	$= 0$	$= 0$	Calor específico para $H = 0$
$\beta$	$M \sim (-\varepsilon)^\beta$	$< 0$	$= 0$	$= 0$	Magnetización para $H = 0$
$\gamma$	$\chi \sim (\varepsilon)^\gamma$	$> 0$	$= 0$	$= 0$	Susceptibilidad magnética para $H = 0$
$\delta$	$H \sim  M ^\delta \text{sgn}(M)$	$= 0$	$= 0$	$= 0$	Grado de la isoterma crítica

$C$  denota el calor específico,  $M$  la magnetización,  $\chi$  la susceptibilidad magnética y  $H$  el campo magnético.

## 1 Tabla 2.1

Dado según, la **Tabla 2.1** se definen algunos de los exponentes críticos más usados, relativos a  $\varepsilon$ , para un sistema magnético. En muchos de los casos que se han estudiado, las teorías clásicas predicen correctamente el comportamiento cualitativo del sistema, pero no proporcionan los valores correctos de los exponentes críticos ni de la temperatura crítica, debido

a que no toman en cuenta las correlaciones de corto alcance que son especialmente importantes en el punto crítico.

En base, a estas observaciones, es precisos mencionar que existe otros métodos de solución para este tipo de problemas son series de alta y baja temperatura, el grupo de renormalización, el método de Monte Carlo, además de algunas soluciones exactas. Siendo el método Montecarlo permite tener mayor confiabilidad desde el punto de vista numérico para entender este proceso. De las soluciones exactas que se mencionan, la más conocida es la de L. Onsager al modelo de Ising bidimensional en ausencia de campo magnético externo, **(Onsager, L., 1994)**.

## Propiedades macroscópicas de un sistema

Se sabe que la idea principal de la física estadística es describir el sistema macroscópico mediante propiedades termodinámicas que derivan de promedios estadísticos sobre las configuraciones del sistema, es decir, sobre cada uno de sus posibles estados microscópicos. Considerando el número de partículas  $N$  fijo y una temperatura  $T$  fija también, considerando canónico **(Creutz, 1983)**. En este colectivo, la probabilidad de que el sistema a una temperatura  $T$  dada esté en una configuración determinada de energía  $E$  es proporcional al factor de Boltzmann:

$$P_E = \frac{e^{-\beta E}}{\sum_v e^{-\beta E_v}} = \frac{e^{-\beta E}}{Z} \quad (1)$$

Donde,  $\beta = \frac{1}{K_B T}$

Siendo  $K_B$  es la constante de Boltzmann, y  $Z$  se define como la función de partición, que es simplemente el factor de partición, que es simplemente el factor de normalización de la probabilidad que recorre en todas las posibles configuraciones del sistema, **(Creutz, 1983)**.

A partir de la ecuación anterior permite relacionar los diferentes parámetros termodinámicos, como por ejemplo la energía del sistema  $U$  y el calor específico a volumen constante  $C_v$ .

$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_v E_v e^{-\beta E_v}}{Z} \quad (2)$$

Por otro lado, el calor específico a volumen constante viene definido por:

$$C_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right) \quad (3)$$

Sin embargo, a nosotros nos interesa una forma que podamos calcular numéricamente por lo que se puede expresar la ecuación (3) como la energía promedio:

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{\sum_v E_v e^{-\beta E_v}}{Z} = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial T} \sum_v E_v e^{-\beta E_v} + \sum_v E_v e^{-\beta E_v} \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{Z} \right)$$

$$C_v = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\sum_v E_v^2 e^{-\beta E_v}}{Z} - \frac{1}{k_B T^2} \left( \frac{\sum_v E_v e^{-\beta E_v}}{Z} \right)^2$$

Ahora bien, estas expresiones se corresponden con  $\langle E^2 \rangle$  y  $\langle E \rangle^2$  por lo que el calor específico queda de la forma más útil de poder utilizar numéricamente.

$$C_v = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (4)$$

En lo que respecta a las funciones relativas al magnetismo, lo más significativo es encontrar la magnetización  $M$ , que es la suma de todos los momentos de las partículas, y la susceptibilidad magnética  $\chi$ . Siendo  $B$  el campo magnético aplicado, entonces:

$$M = \langle M \rangle = \frac{\sum_v M_v e^{-\beta E_v}}{Z} \quad (5)$$

$$\chi = \left( \frac{\partial M}{\partial B} \right)_T \quad (6)$$

$$\chi = \frac{1}{k_B T^2} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (7)$$

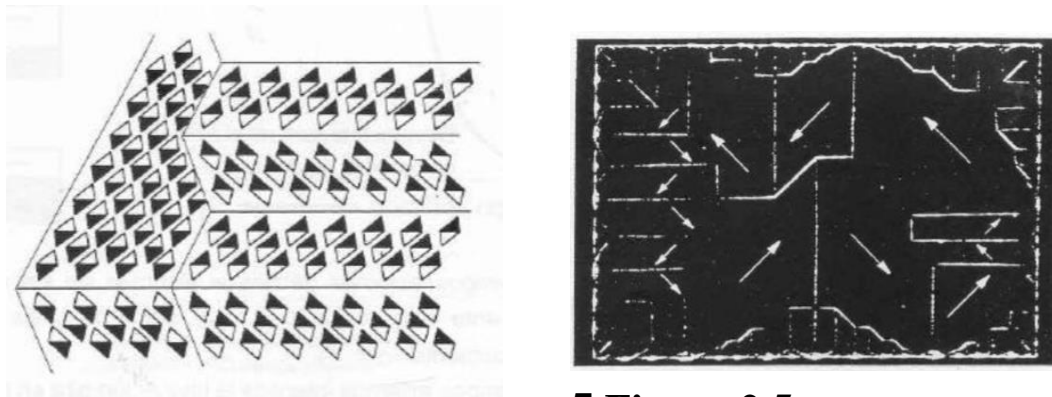
## El Ferromagnetismo e importancia

El estudio de los comportamientos de los materiales frente al campo magnético se puede clasificar ciertos materiales como llamados diamagnéticos que tienen emanación en dirección contraria al campo aplicado y son repelidos hacia regiones del campo más débil, dado que este fenómeno es común a todos los átomos, ya que la inducción de Faraday provocará un momento inducido, en sentido contrario al campo, es decir una magnetización en sentido contrario al campo por tanto podemos afirmar el efecto diamagnético en el material siempre existirá, dentro de lo cual tenemos ejemplos como el agua, bismuto metálico, los gases nobles, derivados del carbono como grafito, silicio, magnesio, etc. Es decir, son elementos generalmente tienen el número par de electrones **(Creutz, 1983)**.

Mientras que los materiales paramagnéticos son atraídos débilmente por un imán, la temperatura influye apreciablemente en dicha atracción, cuando la temperatura aumenta y la fuerza disminuye y viceversa, es como si se opusiese a la fuerza de atracción.

En estos elementos la magnetización estaría en la misma dirección que el campo aplicado, ósea se imana en la misma dirección del campo y por tanto esto conduce que el valor de la susceptibilidad magnética es positivo, dado que aplicación más rigurosa de esta explicación dentro del enfoque de la mecánica cuántica. Dado que su naturaleza radica en la existencia de un momento magnético asociado al electrón de valor constante y de sentido contrario al momento cinético del electrón que denomina spin del electrón, entre los materiales más conocidos de ese tipo materiales tenemos magnesio, molibdeno, litio, tántalo, etc., cuya característica es baja susceptibilidad **(Creutz, 1983)**.

La explicación del ferromagnetismo es un este fenómeno se basa en que los materiales ferromagnéticos macroscópicos están compuestos de un gran número de pequeñas regiones o dominios magnéticos en cuyo interior la imanación local está saturada.

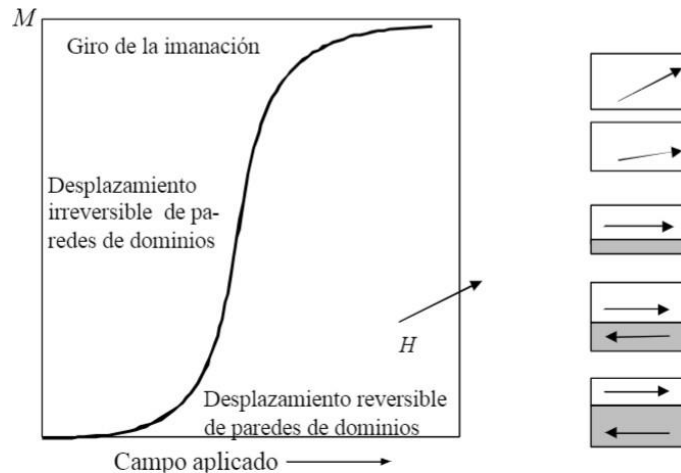


**5 Figura 2.5**

**Figura 2.5.** Orientación de los dipolos magnéticos en un material ferromagnéticos.

La importancia de materiales ferromagnéticos es aquellos atraídos muy fuertemente por un imán y por tanto se imanar en la misma dirección del campo magnético aplicado de los hechos experimentales más sobresalientes se presentan los materiales ferromagnéticos se puede resumir en lo siguiente.

- a) Aparece una gran fuerza en las proximidades del imán y siempre es de atracción.
- b)** No existe proporcionalidad entre la magnetización y la excitación o magnética ósea la susceptibilidad magnética no es constante, dado que la relación de la magnetización y el campo magnético aplicado no tiene expresión analítica y se establece de forma gráfica, se obtiene una curva parecida a la **Figura 2.6**.

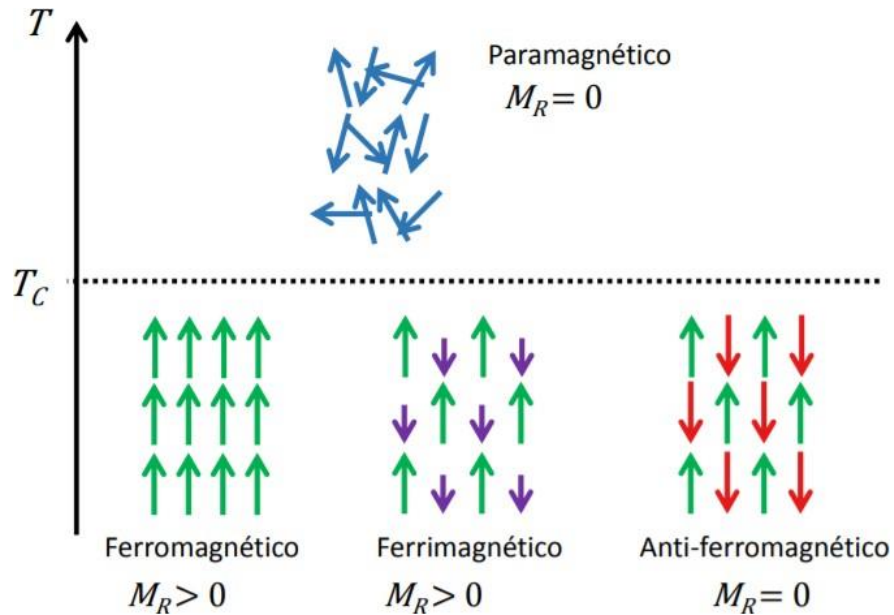


**Figura 2.6**

**Figura 2.6.** Relación entre la magnetización ( $M$ ) y el campo aplicado ( $H$ )

En la **Figura 2.6** se puede mostrar una primera zona de imanación aumenta muy despacio a continuación aparece una zona bastante y por último después de un codo la magnetización no aumenta, aunque haya  $H$  (**Creutz, 1983**). Entonces se dice que el material se ha saturado y no se puede imanar más. Dicha curva recibe el nombre de curva de magnetización o imanación del material.

- c) Otro fenómeno muy interesante e importante es el hecho de los materiales ferromagnéticos es de mantener la imanación permanente (esto quiere decir que el material permanece imanado a pesar de que el campo externo no exista).
- d) Las propiedades ferromagnéticas o más sencillamente la imanación desaparece por encima de la temperatura determinada como característica de cada material y que se denomina temperatura de Curie. Por ejemplo, para el hierro es  $770^{\circ}\text{C}$  y para el Níquel  $358^{\circ}\text{C}$ .



7

### Figura 2.7

**Figura 2.7.** Comportamiento de los materiales ferromagnéticos en límite de la temperatura crítica o de Curie.

En la **Figura 2.7**, se observa que según la agitación térmica vence a la energía de intercambio que mantiene a los momentos magnéticos alineados, y el comportamiento pasa a ser Paramagnético con cero magnetizaciones. Esta temperatura de transición se denomina temperatura de Curie ( $T_C$ ) para ferromagnetos y ferrimagnetos, y en el caso de los antiferromagnetos se denomina temperatura de Néel.

Tener en cuenta, cuando se incrementa la temperatura de un material ferromagnético o ferrimagnético, la energía térmica adicional incrementa la movilidad de los dominios, facilitándoles su alineación, pero también impidiendo que se conserven alineados cuando se elimina el campo (**Creutz, 1983**).



**Tabla 2.2.** Temperatura de Curie para algunos materiales conocidos.

Material	Temperatura de Curie (°C)
Gadolinio	16
Nd <sub>2</sub> Fe <sub>12</sub> B	312
Níquel	358
BaO · 6Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	469
Co <sub>5</sub> Sm	747
Hierro	771
Alnico 1	780
Cunico	855
Alnico 5	900
Cobalto	1117

**2 Tabla 2.2**

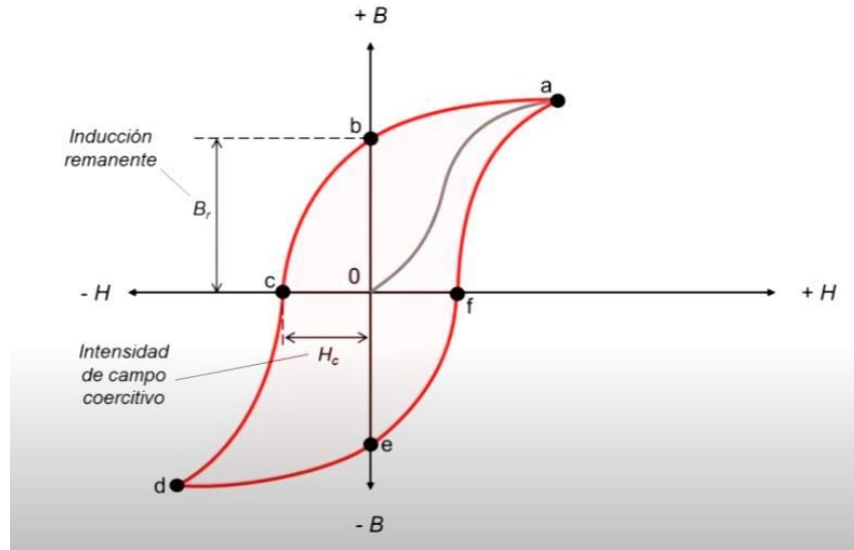
- e) En un material paramagnético los momentos magnéticos no poseen ninguna orientación preferencial, y en consecuencia ninguna magnetización espontánea. En presencia de un campo magnético externo, los momentos magnéticos tenderán a alinearse magnetizando al material. Este proceso se denomina magnetización inducida.
- f) Ocurrencia de fenómeno denominado “Histéresis magnética” que se pone de manifiesto al estudiar la evolución completa de B y H.

### Curva de histéresis

El ciclo de Histéresis entre  $\vec{B}$  y  $\vec{H}$ , es una consecuencia de la curva entre  $\vec{M}$  y  $\vec{H}$ , dado que:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$$

**Figura 2.8**, se parte de un material, que no está imanado al ir aumentando **H**, aumenta **B**, lo que se llama curva de imanación y la saturación se obtiene cuando se obtiene una pendiente constante entre **B** y **H**. Luego se disminuye **H** y la curva no recorre el mismo camino, llegando a **H**=0, y por tanto existe un valor de **B** y por tanto de **M** ósea el material se quedado imanado.



8

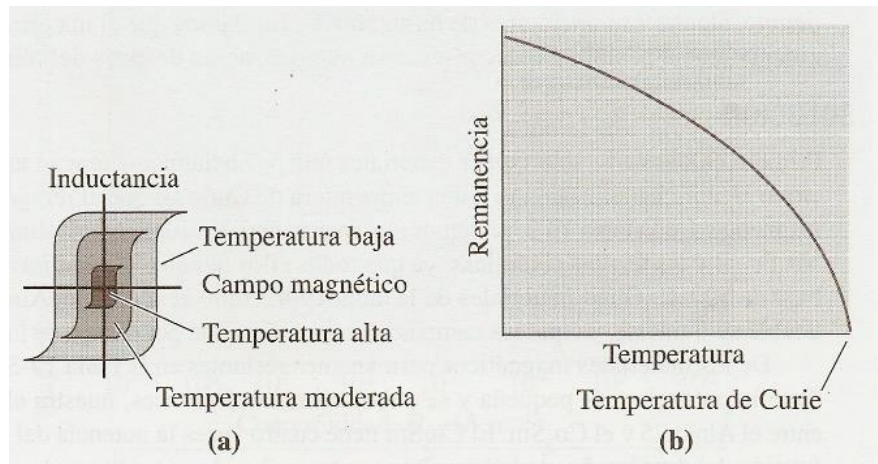
### Figura 2.8

**Figura 2.8.** Curva de histéresis de un material ferromagnético al estar sometido a campo magnéticos externos.

Si se cambia el sentido de **H**, para ello bastara cambiar el sentido de la corriente que genera **H**, se llega a un punto donde **B=0**, para un valor de **H**, lo que recibe el nombre fuerza coercitiva es la fuerza capaz de romper la imanación. Y luego se sigue el mismo proceso hasta llegar al punto a.

La energía magneto estática es la energía potencial magnética de un material ferromagnético debida al campo magnético externo generado y este proceso de imanación se gasta energía empleada en desplazar las paredes de los dominios y en girar la imanación en el sentido del campo aplicado.

Los materiales ferromagnéticos y ferromagnéticos se clasifican como magnéticamente suaves o duros, dependiendo de la forma de su ciclo de histéresis, Los materiales ferromagnéticos suaves se utilizan a menudo para mejorar la densidad de flujo magnético (B) producida cuando se hace pasar una corriente eléctrica a través del material y tienen como características físicas de magnetización de alta saturación, alta permeabilidad, pequeño campo coersitivo. Aleaciones de Fe y Si, son materiales magnéticos blandos de más amplia utilización, por ejemplo, en motores, transformadores ó generadores, son las aleaciones de Fe con 3-4% en peso de Sí.



9

### Figura 2.9

**Figura 2.9.** (a) El área del ciclo representa la energía magnética presente en el proceso, y también dicha área depende de la temperatura, (b) la curva en el proceso y la temperatura de Curie **(Creutz, 1983)**.

Mientras los materiales magnéticos duros, estos materiales se iman en un campo magnético lo suficientemente fuerte como para orientar sus dominios magnéticos en la dirección del campo aplicado.

Una parte de la energía aplicada del campo se convierte en energía potencial que se almacena en el imán permanente producido. Un imán permanente, por consiguiente, se encuentra en un estado de energía relativamente alto, comparado con un imán que no está imanado. Los materiales magnéticos duros son difíciles de desimanar, una vez imanados debido básicamente a sus altas constantes de anisotropía cristalina y a defectos que imposibilitan el movimiento de las paredes de dominio. Estos materiales se iman en un campo magnético lo suficientemente fuerte como para orientar sus dominios magnéticos en la dirección del campo aplicado.

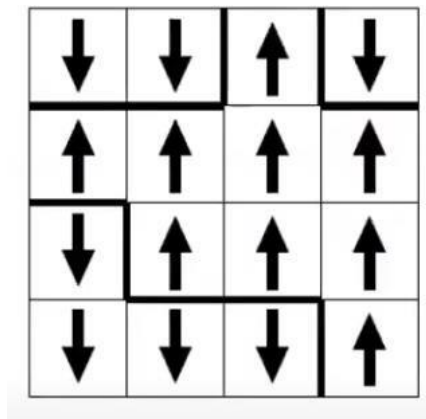
Entre los materiales más usados, Alnico (aleaciones de Al, Ni y Co): Las aleaciones alnico son aleaciones de Al, Ni y Co más Fe como material base, y son los más importantes materiales magnéticos duros que se utilizan hoy en día. En EE. UU. Cuentan con un 35% del mercado de los materiales magnéticos. Estas aleaciones se caracterizan por un producto  $(BH)_{máx}$ , muy alto, una alta imanación remanente y una fuerza coercitiva moderada, Aleaciones de las Tierras Raras, se están empezando a producir a gran escala y tienen propiedades magnéticas superiores a las de cualquier material magnético comercial.

## El Magnetismo y el modelo ISING

El ferromagnetismo que aparece en muchos materiales ordinarios como el hierro y el níquel es la presencia de magnetización espontánea e incluso cuando hay campo magnético externo. Se sabe que una fracción importante de momentos magnéticos o spines de los átomos se alinean en la misma dirección debido a la interacción entre ellos, dando lugar que se emane la muestra **(Klaus, 1995)**.

El modelo de Ising pertenece a una clase de modelos en donde los sistemas se modelan como una red con una base de microsistemas en los sitios de la red, dichos microsistemas pueden tener un número discreto o continuo de estados y habrá una cierta interacción definida entre los sitios. Por tanto, se considera como un modelo físico propuesto para estudiar el comportamiento de los materiales ferromagnéticos fue inventado por **Wilhelm Lenz (1920)** que lo propuso como un problema a su alumno Ernst Ising para demostrar que el sistema presentaba transición de fase.

Es un modelo de red que consiste en una colección de momentos magnéticos que se denotan por flechas y las cuales podemos pensar como átomos cuyo spin tienen un momento magnético **(Muglia, 2011)**.



**Figura 2.10**

**Figura 2.10.** Estructura bidimensional de los spines.

10

Se parte de una red regular que imita a la red cristalina de hierro o níquel, dado que un spin es un fenómeno cuántico. Por conveniencia se toma valores +1 o -1 y  $J$  es la energía de interacción entre los espines  $i$ -ésimo y  $j$ -ésimo, así mismo están en sitios contiguos de la red.

El modelo Ising más simple asume interacciones entre vecinos cercanos y por tanto el hamiltoniano o la energía del sistema es:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (8)$$

Donde,  $\langle i,j \rangle$  Indica la suma de spines contiguos.

Donde la ecuación anterior es la energía del estado particular del sistema, y  $S_i = S_j$  entonces la energía del sistema decae una cantidad J.

Donde, significa la expresión 2.2.8, el espín del  $i$ -ésimo átomo y J es un parámetro que mide la intensidad de la interacción de intercambio. Si  $J > 0$ , la energía de interacción es más pequeña cuando los momentos magnéticos son paralelos que cuando son antiparalelos (**Muglia, 2011**). Cuando  $J < 0$  se tiene la situación inversa. Por lo tanto, si  $J > 0$  ( $J < 0$ ) el estado de mínima energía será el que favorezca la orientación paralela (antiparalela) de los momentos magnéticos, esto es, aquel que tienda a producir ferromagnetismo (anti-ferromagnetismo). Además, como la interacción de intercambio depende del grado de traslape que puedan alcanzar las funciones de onda de los electrones de los dos átomos, J cae rápidamente con el incremento en la separación entre los átomos, por lo que la interacción de intercambio es apreciable sólo si los átomos están lo suficientemente próximos unos de otros (**Mellor Vincent, 2011**). La mecánica estadística de partículas con interacciones entre vecinos cercanos de la forma  $-JS_i S_j$  es muy complicada, debido al comportamiento cooperativo que presentan. Por este motivo han surgido aproximaciones al modelo de Heisenberg tales como el modelo de Weiss o el modelo de Ising.

Si existe un campo magnético externo H, los momentos magnéticos de interacción con el campo aplicado es:  $E_B = -HS_i$

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (9)$$

Mientras la energía del sistema de spines es mínima los spines son paralelos entre sí, y la temperatura tiene un efecto desordenador lo cual debe considerarse. Asumiendo que los spines

del sistema están en equilibrio térmico con un baño térmico a una temperatura T, el comportamiento puede ser descrito por un ensamble canónico.

Imaginando que, con el paso, del tiempo, los spines se están invirtiendo, y el sistema se va moviendo en diferentes configuraciones (**Mellor Vincent, 2011**). El resultado fundamental de la mecánica estadística en un sistema en equilibrio con un baño térmico, entonces la probabilidad de encontrar el sistema en cualquier estado particular es proporcional al factor de Boltzmann (**Muglia, 2011**).

$$P_{\alpha} = e^{\frac{-E_{\alpha}}{K_B T}} \quad (10)$$

$E_{\alpha}$  : Es la energía en el estado  $\alpha$

$K_B$  : Es la constante de Boltzmann

$P_{\alpha}$  : Es la probabilidad de encontrar al sistema en el estado  $\alpha$

Y cada uno de estos estados es una configuración particular de spines a los cuales se refiere a un microestado del sistema, por tanto, si tenemos un mallado de N spines Ising cada spin puede tener dos posibles estados entonces hay  $2^N$  diferentes posibles microestados del sistema.

Desde el punto de vista microscópico la interacción de spines del sistema con baño térmico causa que el sistema va a transiciones de microestado a otro. Los Spines dan vuelta de +1 a -1 viceversa así también se ganan o se pierden energía (**Muglia, 2011**).

Una medida macroscópica de una cantidad como el momento magnético total o magnetización se obtiene promediando los microestados que el sistema visita durante el tiempo de una medida realizada, entonces el momento magnético de un microestado  $M_{\alpha}$  es la suma de valores de  $S_j$  para todos los spines en el estado particular, entonces la medida de magnetización del sistema es:

$$M = \sum_{\alpha} M_{\alpha} P_{\alpha} \quad (11)$$

Donde:  $M_{\alpha} = \sum S_j$

Desde el punto de vista analítico solo un número limitado de mallado puede ser estudiado. **Lars Onsager (1944)**, resolvió el modelo Ising en dos dimensiones en un mallado cuadrado regular, sin campo magnético externo y encontró:

$$M(T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \left(1 - \frac{1}{(\sinh(\frac{2J}{K_B T}))^4}\right)^{1/8} & T \leq T_c \end{cases} \quad (12)$$

Con un valor de temperatura critica:

$$\frac{K_B T_c}{J} = \frac{4}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2.269185314 \quad (13)$$

### III. VARIABLES E HIPÓTESIS

#### 3.1 Definición de las variables

Bajo el nombre del Método Montecarlo, se agrupan una serie de procedimientos que analizan distribuciones de variables aleatorias tratando de simular una experiencia real y nos permite resolver problemas físicos y matemáticos mediante la simulación de variables aleatorias. El método Montecarlo fue bautizado así por su clara analogía con los juegos de ruleta de los casinos, el más célebre de los cuales es el de Montecarlo, casino cuya construcción fue propuesta en 1856 por el príncipe Carlos III de Mónaco, siendo inaugurado en 1861.

Por otro lado el ferromagnetismo aparece en muchos metales ordinarios como el hierro y níquel, e incluso la presencia de magnetización espontanea en los materiales y para entender el comportamiento el método de Ising es una red cuadrada de interacciones entre los spines hace que surge el alineamiento e incluso a altas temperaturas se genera transiciones de fase, lo cual es importante entender su comportamiento para el mejoramiento de materiales para usos en diferentes campos tecnológicos, en ese contexto se propone las variables dadas como sigue:

**Variable 1:** Simulación Montecarlo basado en el modelo Ising.

**Variable 2:** Transiciones de fase en materiales ferromagnéticos.

#### 3.2 Operacionalización de las variables

Primero se identifica las variables y luego para cada una de las variables se ha determinado los indicadores respectivos que permite operacionalizar de tal forma sea explícito en su cuantificación. A continuación, se muestra en el **Tabla 3.1**.



**Tabla 3.1.** Operacionalización de las variables independiente y dependiente.

<b>Variable</b>	<b>Dimensiones</b>	<b>Indicadores</b>
Simulación Montecarlo basado en el modelo Ising.	Simulación no determinística o estocástica.	Elaboración del algoritmo. Eficiencia del algoritmo.
Transiciones de fase en materiales ferromagnéticos.	Propiedades magnéticas macroscópicas a partir de un comportamiento microscópico.	Magnetización. Calor específico. Temperatura. Susceptibilidad magnética. Energía media.

### **3.3 Hipótesis general e hipótesis específicas.**

#### **Hipótesis General**

HG: Implementar un proceso de simulación Montecarlo basado en el modelo Ising que permitirá obtener transiciones de fase en materiales ferromagnéticos.

#### **Hipótesis Específicos**

HG1: La simulación Montecarlo basado en el modelo Ising permitirá la Magnetización en función de la temperatura.

HG2: La simulación Montecarlo basado en el modelo Ising permitirá del calor específico en función de la temperatura.

HG3: La simulación Montecarlo basado en el modelo Ising permitirá de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura.

HG4: La simulación Montecarlo basado en el modelo Ising permitirá de la energía media en función de la temperatura.

## **IV. DISEÑO METODOLOGICO**

En esta sección se describe los aspectos metodológicos de la investigación, los instrumentos utilizados y el procedimiento de análisis realizado. En primer lugar, se desarrolla el método utilizado, haciendo referencia al ámbito de esta tesis, enumerando las fases de la investigación, presentando los elementos del método Montecarlo, seguidamente se analiza las variantes del método Montecarlo cuyo enfoque está basado en el modelo de red llamada Ising, mediante diagrama de flujo y pseudo códigos que permite entender los procesos realizados.

Dentro de las categorías esta tesis se ubicaría en resultados cuantitativos, teniendo en cuenta cuantitativa se debe usar instrumentos para medir las hipótesis. Una vez medidas los datos de las variables se guardarán y se analizarán estadísticamente a través de la computadora.

### **4.1 Tipo de Investigación**

Esta investigación es de enfoque mixto, es decir, se contrasta la hipótesis y se interpreta los resultados, y desde la categorización es de nivel descriptivo porque propone un algoritmo en Montecarlo para simular los parámetros termodinámicos, como la magnetización, calor específico y susceptibilidad magnética que dichos parámetros son relevantes para entender el proceso que ocurre a nivel atómico mediante la adaptación del método Montecarlo y las definiciones del proceso estadístico del comportamiento de un ensamble canónico.

### **4.2 Diseños de la Investigación**

La investigación responde a un método deductivo, desde que se toma como referencia todos los trabajos realizados de comprensión de conceptos matemáticos y físicos, y el planteamiento del algoritmo basado en el método Montecarlo para implementar en el lenguaje de programación FORTRAN 90.

### **4.3 Población y Muestra**

Dada las características de la investigación no corresponde población y muestra toda vez que es una investigación de características de nivel descriptiva.

## 4.4 Técnicas e Instrumentos de Recolección de Datos

A partir de la simulación permite encontrar comportamientos de parámetros físicos que serán contrastados con resultados teóricos para lo cual se trabaja bajo el entorno Windows 10 y el programa FORTRAN

## 4.5 Procedimiento de Recolección de Datos

El trabajo de recolección de datos consistió en:

- Análisis documental
- Elaboración de algoritmo e implementación en FORTRAN.
- Generación de datos para distintos parámetros de simulación y/o historias.
- SALIDA DE DATOS: en formato \*.txt.
- TRATAMIENTO DE DATOS: se realizará mediante el graficador Octave.
- Tabulación de Cuadros según el comportamiento de las variables físicas involucradas
- Comprensión de gráficos
- Análisis de resultados.

## 4.6 Procedimiento metodológico de la obtención de datos

**Elección de números Pseudoaleatorios:** Uno de los pasos importantes es la generación de valores aleatorios puede y es útil para poner a prueba la efectividad y la fortaleza de un algoritmo. Históricamente hubo diferentes intentos de generar valores aleatorios (**NUMERICAL RECIPES FORTRAN 77, 1992**). La primera máquina fue usada en 1939 por Kendall y Babington-Smith con el fin de producir una tabla de 100000 de dígitos aleatorios y en 1955 la RAND Corporation utilizó extensamente una tabla de 1 000 000 dígitos aleatorios que fue obtenida a partir de una ruleta electrónica especialmente diseñada. ERNIE fue una famosa máquina de números aleatorios que fue usada por la lotería británica, es decir la *British Premium Savings Bonds Lottery* , (**NUMERICAL RECIPES FORTRAN 77, 1992**).

Los números aleatorios son la base esencial de la simulación. Usualmente, toda la aleatoriedad involucrada en el modelo se obtiene a partir de un generador de números aleatorios que produce una sucesión de valores que supuestamente son realizaciones de una secuencia de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas en  $U(0,1)$ . Posteriormente estos números aleatorios se transforman convenientemente para simular las diferentes distribuciones de probabilidad que se requieran en el modelo (**Hjorth-Jensen, 2003**). En general, la validez de los métodos de transformación depende fuertemente de la hipótesis de que los valores de partida son realizaciones de variables aleatorias  $U(0, 1)$ , pero esta suposición realmente no se cumple, puesto que los generadores de números aleatorios son simplemente programas determinísticos que intentan reproducir una sucesión de valores que parezca aleatoria.

Hay varios métodos generales de generación de variables aleatorias y una serie de métodos particulares de las distintas distribuciones. La facilidad de aplicación de dichos métodos, así como el coste computacional asociado a los mismos, varía mucho según la familia de variables aleatorias a las que se apliquen. Normalmente existen varios algoritmos que se pueden utilizar para generar valores de una determinada distribución, y diferentes factores que se pueden considerar para determinar qué algoritmo utilizar como, la exactitud para obtener valores de una variable con una precisión dada, la eficiencia, asociado a un tiempo de ejecución y un gasto de memoria y con complejidad mínima, siempre y cuando se garantice cierta exactitud y facilidad de implementación.

Los números generados por computadora se llaman *números pseudoaleatorios*, dado que son predecibles a partir del primer número denominado *semilla*.

Para poder utilizar un generador automático de números pseudoaleatorios, éste debe cumplir con ciertas propiedades:

- Producir muestras según la distribución  $U(0,1)$
- Pasar los contrastes de aleatoriedad e independencia más habituales
- Que la sucesión generada sea reproducible a partir de la semilla
- Tener una longitud de ciclo tan grande como se desee
- Generar valores a alta velocidad
- Ocupar poca memoria

**Mersenne Twister:** Es un algoritmo de generación de números pseudoaleatorios desarrollado por Makoto Matsumoto y Takuji Nishimura en 1997 y refinado en 2002. Ha pasado todas las pruebas de números aleatorios más rigurosas y ha registrado una mejora muy significativa con respecto a todos los generadores anteriores **(Matsumoto y Nishimura, 1998)**.

El Mersenne twister es un Generador de números pseudoaleatorios, Su nombre proviene del hecho de que la longitud del periodo corresponde a un Número primo de Mersenne. Existen al menos dos variantes de este algoritmo, distinguiéndose únicamente en el tamaño de primos Mersenne utilizados **(Matsumoto y Nishimura, 1998)**. El más reciente y utilizado es el Mersenne Twister MT19937, con un tamaño de palabra de 32-bit. Existe otra variante con palabras de 64 bits, el MT19937-64, la cual genera otra secuencia, este generador de números aleatorios, de Mersenne Twister tiene los siguientes méritos:

- Está diseñado teniendo en cuenta las fallas de varios generadores existentes;
- Ofrece un período mucho más largo y un orden de equidistribución mucho más alto que cualquier otro generador. (Se ha probado que el período es  $(2^{19937}-1)$ , y la propiedad de equidistribución de 623 dimensiones está asegurada.

## V. RESULTADOS

### 5.1 Resultados

#### Teoría del Campo Medio

Este es un aproximado para estudiar las características de las transiciones de fase. No es preciso, pero da un crecimiento la magnetización y está relacionado con el promedio de espines que se alinean.

$\langle S_i \rangle$  : Es el promedio respecto a los diferentes microestados, que son generados que son generados por la vuelta de espines. Es decir, cada uno actúa con 4 espines vecinos. De aquí todos los espines van a tener las mismas propiedades promediadas.

En la magnetización a la temperatura T para N espines es:

$$M = \sum_i S_i = N \langle S_i \rangle \quad (14)$$

Si agregamos un campo magnético al problema, la función de energía se convierte en:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \mu H \sum_i S_i \quad (15)$$

$H$ : Campo auxiliar magnético.

$\mu$ : Momento magnético asociado a cada spin.

Este campo provoca que los espines tienden a alinearse paralelamente a H ya que esto minimiza la energía.

Asumiendo por ahora que nuestro sistema contiene un solo spin  $S_i$ . Este spin tiene dos posibles estados  $S_i = \mp 1$ , cuyas energías son:  $E_{\pm} = \pm \mu H$

La probabilidad de encontrar al sistema en estos dos estados  $P_{\pm}$  son:

$$P_{+} = C e^{-\frac{\mu H}{k_B T}} \quad (16)$$

$$P_- = C e^{-\frac{\mu H}{K_B T}} \quad (17)$$

Donde C es una constante que puede ser determinado por la condición de normalización.

$$P_+ + P_- = C e^{\frac{\mu H}{K_B T}} + C e^{-\frac{\mu H}{K_B T}} = 1 \quad (18)$$

La constante:

$$C = \frac{1}{C e^{\frac{\mu H}{K_B T}} + C e^{-\frac{\mu H}{K_B T}}} \quad (19)$$

El promedio térmico de  $S_i$  puede ser calculado como:

$$\langle S_i \rangle = \sum_{S_i} S_i P_{\mp} = P_+ - P_- = \tanh\left(\frac{\mu H}{K_B T}\right) \quad (20)$$

Este resultado exacto del comportamiento de un solo spin en un campo magnético. Vamos a utilizar este resultado para obtener una aproximación para un sistema de N spines interacciones.

La teoría del valor medio este basado en el supuesto que las interacciones de un spin  $S_i$ .

$\langle S_i \rangle$  Puede ser calculado usando la ecuación (20), reemplazando H por  $H_{ef}$ .

La función de energía de la ecuación de (15) puede ser descrita en la siguiente forma:

$$E = - (J \sum_{\langle i,j \rangle} S_j) S_i - \mu H S_i \quad (21)$$

La cual, muestra que el término que envuelve a J tiene la forma de un campo magnético con  $\mu H_{ef} = J \sum S_i$ , ahora hacemos la aproximación.

Asumiendo que las variables de spin  $S_i$  en la expresión H puede ser reemplazados por sus promedios térmicos.

Ya que todos los spines tienen el mismo promedio de alineamiento sus promedios térmicos van a ser el mismo.

Eliminando los subíndices y haciendo  $H=0$ , tenemos.

$$H_{ef} = \frac{J}{M} \sum \langle S \rangle = \frac{ZJ}{\mu} \sum \langle S \rangle \quad (22)$$

Donde  $Z$  es el número de vecinos más cercanos, combinando de la ecuación 20 y la ecuación 22, encontramos.

$$\langle S \rangle = \tanh\left(\frac{\mu Z J \langle S \rangle}{\mu K_B T}\right) \quad (23)$$

$$\langle S \rangle = \tanh\left(\frac{Z J \langle S \rangle}{\mu K_B T}\right) \quad (24)$$

Este es la relación implícita para  $\langle S \rangle$ , la cual no se puede resolver analíticamente excepto para ciertos límites. El siguiente programa encuentra  $\langle S \rangle$  como función de temperatura. Tal que, **Onsager** en la ecuación (13), y este modelo obtuvo un valor incorrecto, pero hay una transición de fase y hay una temperatura crítica. Realizando un desarrollo en la serie de Taylor de la ecuación (24), tomamos los dos primeros términos.

$$\tanh(x) = x - \frac{x^3}{3} \quad (25)$$

Para  $x$  pequeña, entonces cuando  $\langle S \rangle$  es pequeño, se tiene:

$$\langle S \rangle \approx \frac{Z J \langle S \rangle}{K_B T} - \frac{1}{3} \left(\frac{Z J \langle S \rangle}{K_B T}\right)^3 \quad (26)$$

Lo cual tiene una solución  $\langle S \rangle = 0$  y

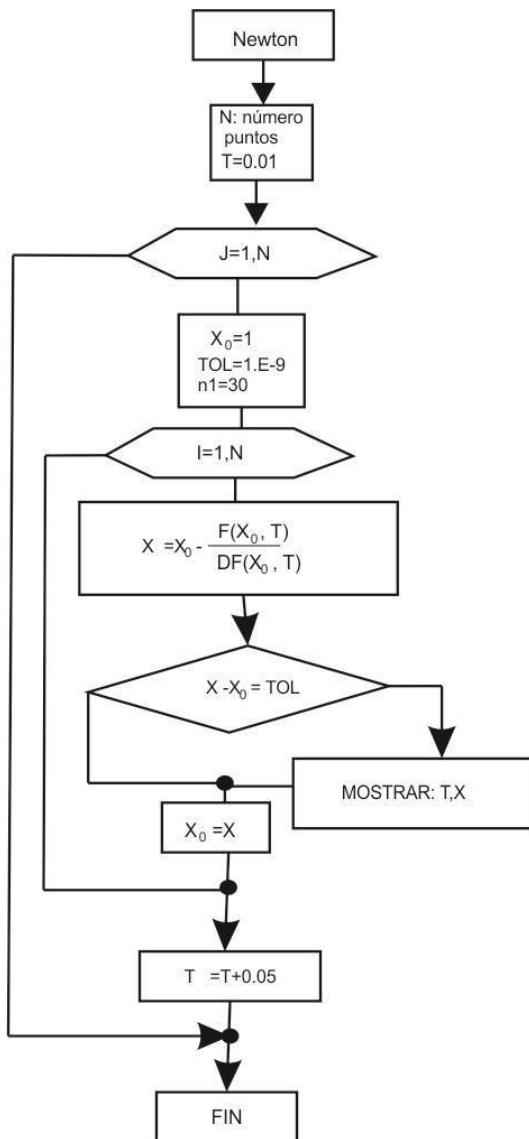
$$\langle S \rangle = \sqrt{\frac{3}{T} \left(\frac{K_B T}{Z J}\right)^3} \left(\frac{Z J}{K_B} - T\right)^{1/2} \approx (T_C - T)^\beta \quad (27)$$

Donde,  $T_c = \frac{ZJ}{K_B}$ ; donde  $T_c = 4$ , en las unidades que escogimos y  $\beta = 1/2$ , la teoría del campo medio produce un cambio abrupto en la transición ferromagnetismo y la transición paramagnetismo.



También predice correctamente la singularidad cerca de  $T_c$  pero no predice coeficiente crítico.

La ecuación 24, se ha implementado utilizando las aproximaciones en 25, mediante el método de Newton para ecuaciones no lineales, para lo cual se ha realizado un algoritmo basado en el siguiente diagrama de flujo, ver **Figura 5.1**.

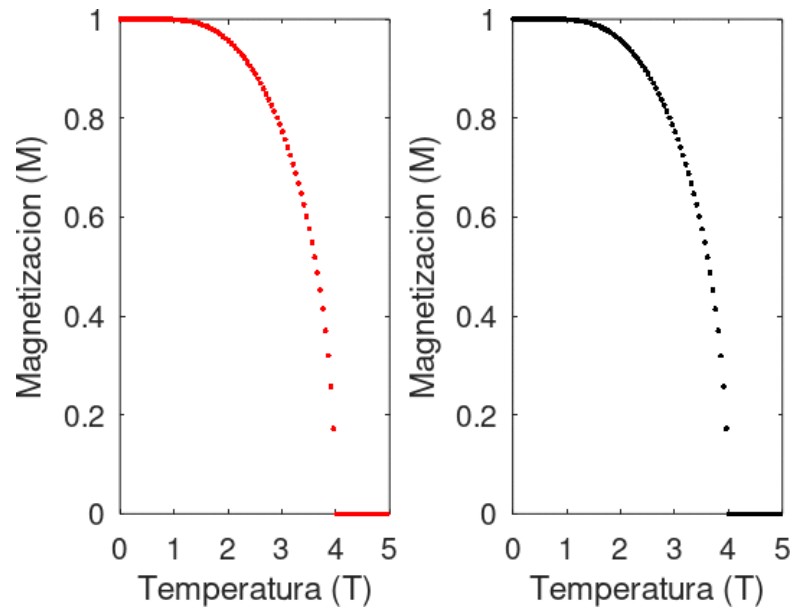


**Figura 5.1**

**Figura 5.1.** Diagrama de flujo, que corresponde al método de newton para ecuaciones no lineales.

La implementación del diagrama de flujo en FORTRAN 90, se encuentra el código completo en el anexo 2.0., el resultado obtenido es como se muestra en la Figura 5.2, donde se ve claramente, el comportamiento de la magnetización en función de la temperatura, por lo que el

modelo del valor medio si bien muestra una aproximación en el comportamiento pero el resultado numérico es totalmente incorrecto, que según **Onsager** de la ecuación 13, no coincide y por lo tanto es un valor incorrecto, pero si reproduce este modelo la transición de fase y también nos dice que si existe una temperatura critica.



12

**Figura 5.2**

**Figura 5.2.** Comportamiento de la magnetización mediante el método del valor medio, para 100 y 200 puntos, donde se observa que reproduce el proceso de transición de fase.

## 5.2 El método Monte Carlo

Con el nombre del método Monte Carlo, se conoce un conjunto de métodos de características probabilísticas y en contexto, está relacionado como un proceso estocástico basado en sistemas que se desarrolla en el tiempo mientras que pasa por fluctuaciones al azar, es decir toda variable que evoluciona a lo largo del tiempo de forma total o parcialmente aleatoria. Entonces podemos decir palabra estocástica es sinónimo de aleatorio, es un sistema que se desarrolla en el tiempo por fluctuaciones al azar. En consecuencia, es frecuente hablar de experimento que viene a ser un proceso o un procedimiento cuyo resultado se puede observar, pero cuyo valor no podemos determinar anticipadamente con certeza. Cada resultado posible

del experimento se llama punto muestral y se denomina  $w_i$ , un espacio muestral es el conjunto de todos los resultados del experimento que a priori se conocen como posibles:

$$\Omega = \{w_i; w_i \text{ es un resultado observable del experimento}\}$$

Se entiende que un espacio muestral, es definido como un modelo del experimento. A su vez, el Método Montecarlo se basa en el error  $\sim 1/\sqrt{N}$ , donde  $N$  es el número de pruebas y por tanto, ganar una cifra decimal en la precisión implica aumentar  $N$  en 100 veces. La base es la generación de números aleatorios de los que nos serviremos para calcular probabilidades. Conseguir un buen generador de estos números, así como un conjunto estadístico adecuado sobre el cual trabajar son las primeras dificultades con la que, nos vamos a encontrar a la hora de utilizar este método.

## **Generación de Números aleatorios**

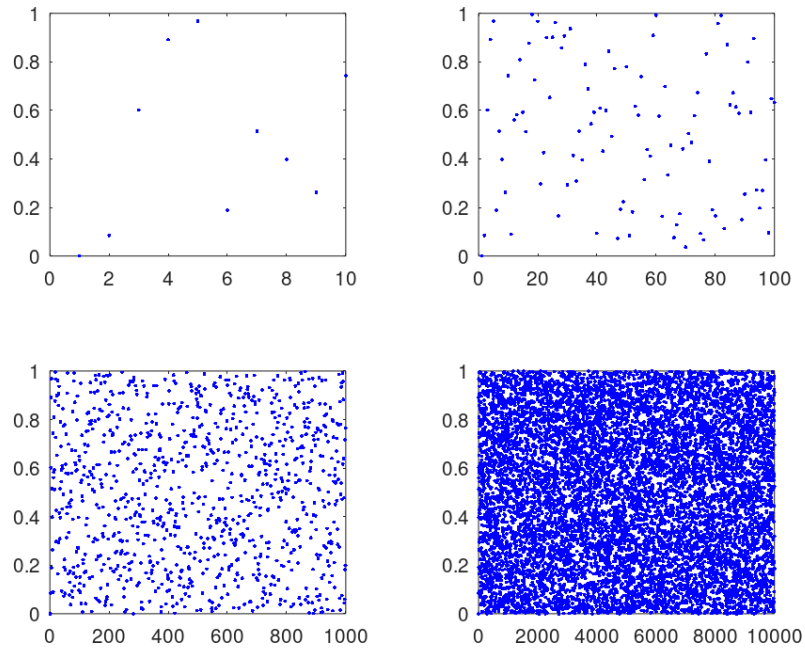
Como sabemos es un numero escogido como si se obtuviera una distribución específica tal que una larga selección de estos números produce una distribución, para lo cual se desea que generalmente esta distribución sea lo más independiente posible, tal que, Presentan una independencia entre sí, de forma que puede establecerse una correlación entre dos números obtenidos entre sí, por lo que estos números aleatorios obtenidos por computadora se llaman números pseudoaleatorios, por lo que para esta investigación se hizo las pruebas para establecer una diferencia entre diferentes generadores y tener un generador específicos para esta tesis.

- **Generador Intrínseco de la rutina de FORTRAN 90**

CALL RANDOM\_SEED(SEED): Esta es una rutina de las librerías de FORTRAN, que permite obtener la semilla.

CALL RANDOM\_NUMBER(R): Es el generador que utiliza el resultado anterior para generar valores pseudoaleatorios con distribución uniforme en el rango [0,1].

El resultado obtenido para 10, 100, 1000 y 10000 iteraciones, lo cual se muestra en la **Figura 5.3**. El código completo en el **Anexo 2.1**.



13

**Figura 5.3**

**Figura 5.3.** Distribución de valores obtenido para 10, 100,1000 y 10000 iteraciones.

- **Generador Ran0 de las Recetas Numéricas de FORTRAN 77**

Este generador se debe **Park y Muller**, quien ha probado un gran número de generadores y está basado en generador de congruencia multiplicativo simple y está dado por:

$$I_{j+1} = aI_j \pmod{m} \quad (28)$$

En 1969, pasa todas las pruebas teóricas, y se le conoce como el generador de la “mínima estándar” basado en los siguientes valores:

$$a = 7^5 = 16807 ; m = 2^{31} - 1 = 2147483647 \quad (29)$$

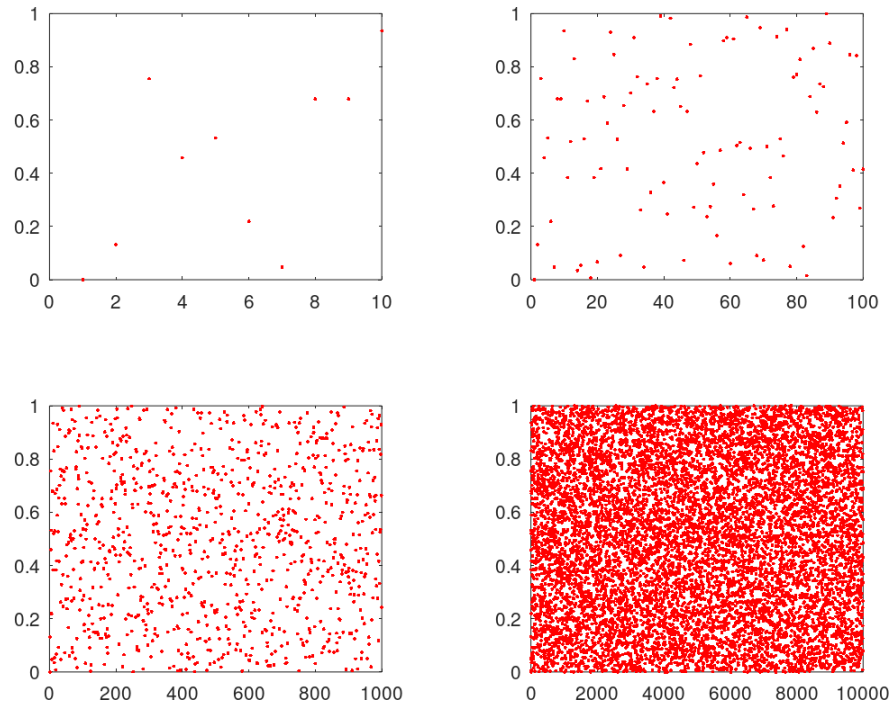
Este generador de mínima estándar es implementado en cualquier lenguaje de programación y en cualquier maquina portátil y el algoritmo está basado en el algoritmo de Schrage y es basado en una aproximación de factorización de m,

$$m = aq + r \rightarrow q = [m/a] ; r = m \bmod a \quad (30)$$

Con corchetes se denota la parte más entera. Si r es pequeña, y específicamente  $r < q$ , y  $0 < z < m - 1$ , se puede demostrar que  $a(z \bmod q)$  y  $r[z/q]$  se encuentra en el rango  $0, \dots, m - 1$  y que:

$$az \bmod m = \begin{cases} a(z \bmod q) - r \left[ \frac{z}{q} \right] & ; \text{si esto es } \geq 0 \\ a(z \bmod q) - r \left[ \frac{z}{q} \right] + m & ; \text{otros casos} \end{cases} \quad (31)$$

Según el algoritmo de Schrage las constantes de la ecuación 29 es usado y los valores para  $q = 127773$  y  $r = 2836$ , lo cual ha sido implementado y se obtenido la figura 5.4, muestra mayor dispersión de los valores obtenidos y por tanto a diferencia del anterior, es una buen generador que podría utilizarse con la confiabilidad del caso (**NUMERICAL RECIPES FORTRAN 77, 1992**). El código completo en el **Anexo 2.2**.



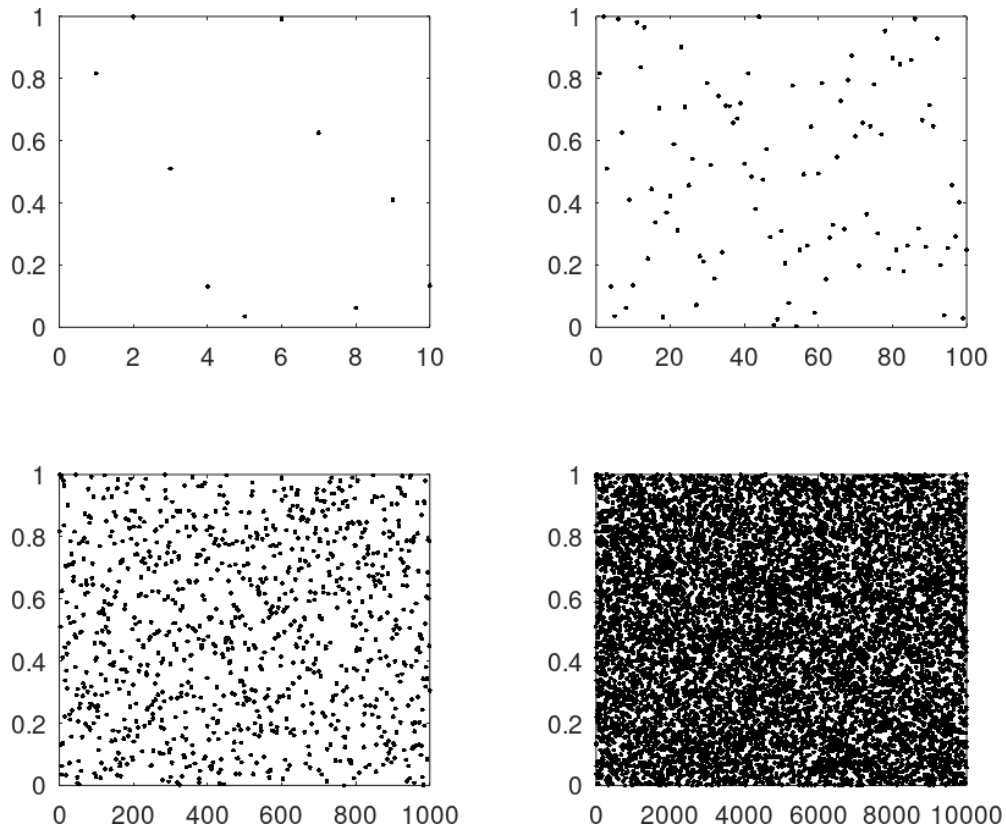
14

**Figura 5.4**

**Figura 5.4.** Distribución de valores obtenido para 10, 100,1000 y 10000 iteraciones.

- **Generador de MERSENNE TWISTER FORTRAN 77**

Su nombre proviene del hecho de que la longitud del periodo corresponde a un Número primo de Mersenne. Por lo que, existen al menos dos variantes de este algoritmo, distinguiéndose únicamente en el tamaño de primos Mersenne utilizados. El más reciente y utilizado es el Mersenne Twister MT19937, con un tamaño de palabra de 32-bit, el programa se encuentra en **(Matsumoto y Nishimura, 1998)**. Por lo que se realizó una adaptación en FORTRAN 90, para su ejecución y bajo las mismas condiciones de los anteriores se ha realizado y se obtenido la Figura 5.4, obteniéndose resultados casi al mismo nivel del grafico 5.5, por lo que se optado en esta tesis estos dos generadores para obtener los resultados posteriores y el código se encuentra en el anexo 2.3.



15

**Figura 5.5**

**Figura 5.5.** Distribución de valores obtenido para 10, 100,1000 y 10000 iteraciones.

### 5.2.2 Algoritmo de Metrópolis para el Método Montecarlo

Una vez, definido el generador uniforme óptimo para este procesos, el siguiente proceso está en diseñar una estructura basado en el algoritmo de metrópolis, con la finalidad de calcular estructuras magnéticas estáticas por el método Montecarlo que consiste en la configuración de imanación de equilibrio a través de minimización de energía, para lo cual se basa en el continuo de imanación por un conjunto discreto de malla o retícula de celdas, donde cada celda está ocupado por un spin hacia arriba o spin hacia abajo, de forma desordenada de tal manera luego de un proceso de exposición a un material magnético, estos spines tendrán un nuevo reordenamiento, tal como ocurre en los materiales ferromagnéticos **(Metrópolis et al., 1953)**.

En ese sentido, siguiendo con la idea mencionada se utiliza el método Monte Carlo, en particular para el modelo de Ising se considera que la probabilidad de que los espines se encuentren en una dirección o en la dirección opuesta es la misma.

El modelo de Ising es un sistema que tiene su ordenación a bajas temperaturas. Por tanto, antes de seleccionar el algoritmo a utilizar habrá que tener en consideración esta característica, si consideramos que a temperaturas bajas la mayor parte de las configuraciones presentan una probabilidad próxima a cero, a excepción del estado fundamental y los primeros estados excitados.

Para lo cual una matriz de datos o celdas donde contiene  $N$  espines de la red tiene la misma probabilidad, y de este modo se escoge la casilla aleatoriamente y se calcula el incremento de energía  $\Delta E$ , lo cual sea necesario para cambiar el spin en esa casilla. Y a continuación se estima la probabilidad de transición mediante la expresión:

$$F = \begin{cases} \frac{1}{r} e^{-\frac{\Delta E}{KT}} & \Delta E > 0 \\ \frac{1}{r} & \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (32)$$

Donde la  $K$  es la constante de Boltzmann y la  $T$  la temperatura. La constante  $r$  simboliza la escala de tiempo para el estudio Montecarlo es proporcional a  $e^{-Q/KT}$  y  $Q$  es la energía de activación relacionada con el acoplamiento térmico.

En nuestro estudio hemos considerado el modelo de Ising, con la interacción a primeros vecinos, el hamiltoniano en ausencia de campo en una red de  $N$  espines lo podemos expresar como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j ; S_i = \pm 1 \quad (33)$$

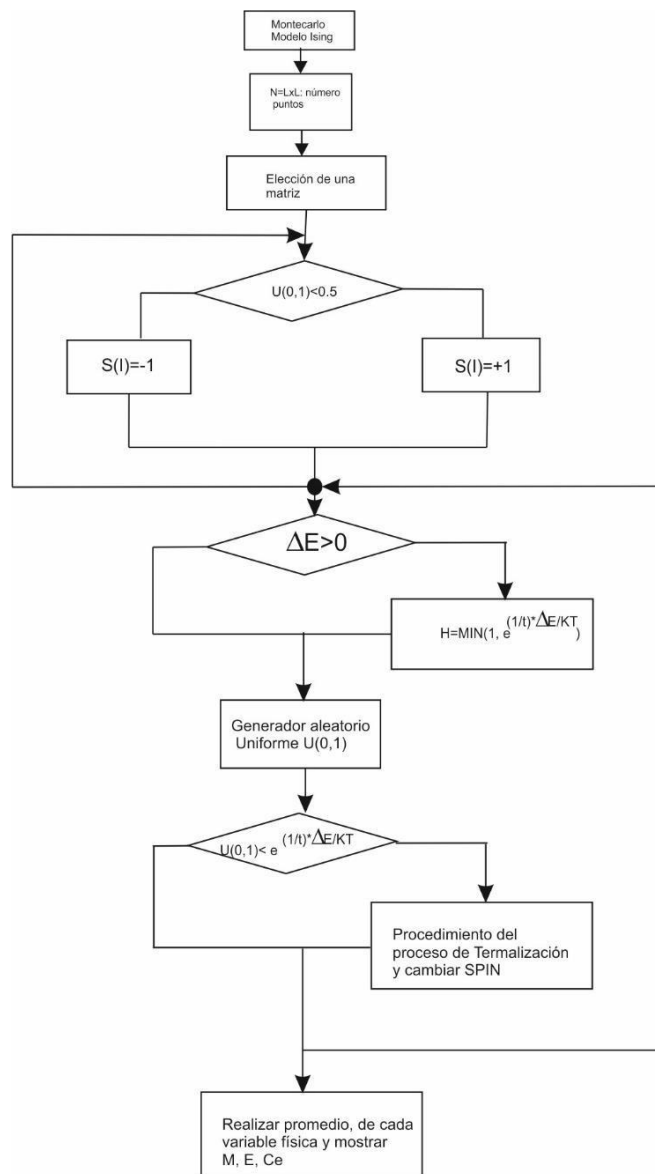
Por otra parte, en el caso en que  $\Delta E < 0$ , la probabilidad de transición utilizando este algoritmo no es necesariamente la unidad, lo que permite una interpretación física del algoritmo como un proceso dinámico y por tanto el modelo de Ising dotado de estas características se le llama modelo de Ising cinético (**Metrópolis et al., 1953**).



Por tanto el algoritmo de metropolis se resume en los siguientes pasos:

- Elección aleatoria un estado del sistema
- Se calcula la diferencia de energía del estado anterior por medio de un proceso perturbativo.
- Se compara si la diferencia de energía es mayor que cero. Si cumple se asigna un nuevo estado , sino se acepta dicho de probabilidad P.

En base a la idea anterior se realizo un diagrama de flujo basado en el metodo Montecarlo mediante el algoritmo de metropolis, para el modelo Ising, **ver figura 5.7.**

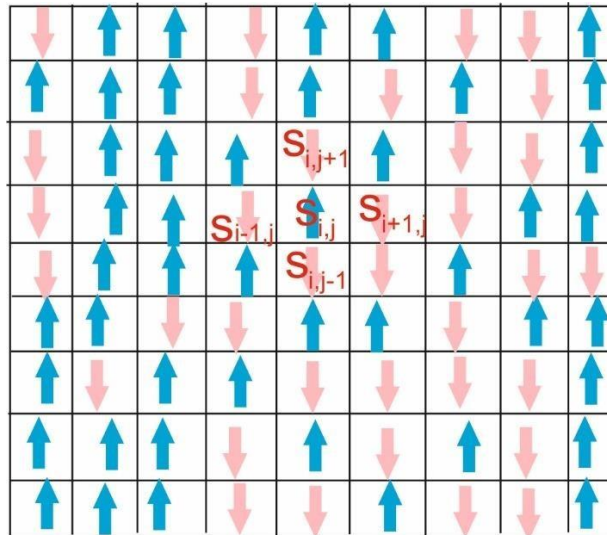


**Figura 5.7**

**Figura 5.7.** Diagrama de flujo, para el modelo Ising mediante el método Montecarlo del algoritmo de metrópolis.

En resumen, del diagrama de flujo de la Figura 5.7, consiste una red con valores aleatorios de direccionados hacia arriba y hacia abajo, una compuesta la red, se escoge un spin mediante una ubicación aleatoria en la red  $S_{i,j}$  y de esta sección se calcula la diferencia de energía  $\Delta E$ , esto es debido a la interacción de energía con los vecinos cercanos y el campo magnético externo actuando sobre la red es cero en primera instancia. Por lo que se tendría en el orden  $(i,j)$  basado en la **ecuación 19**:

$$\Delta E = -JS_{i,j}\{S_{i,j-1} + S_{i,j+1} + S_{i-1,j} + S_{i+1,j}\} - HS_{i,j} \quad (34)$$



**Figura 5.8**

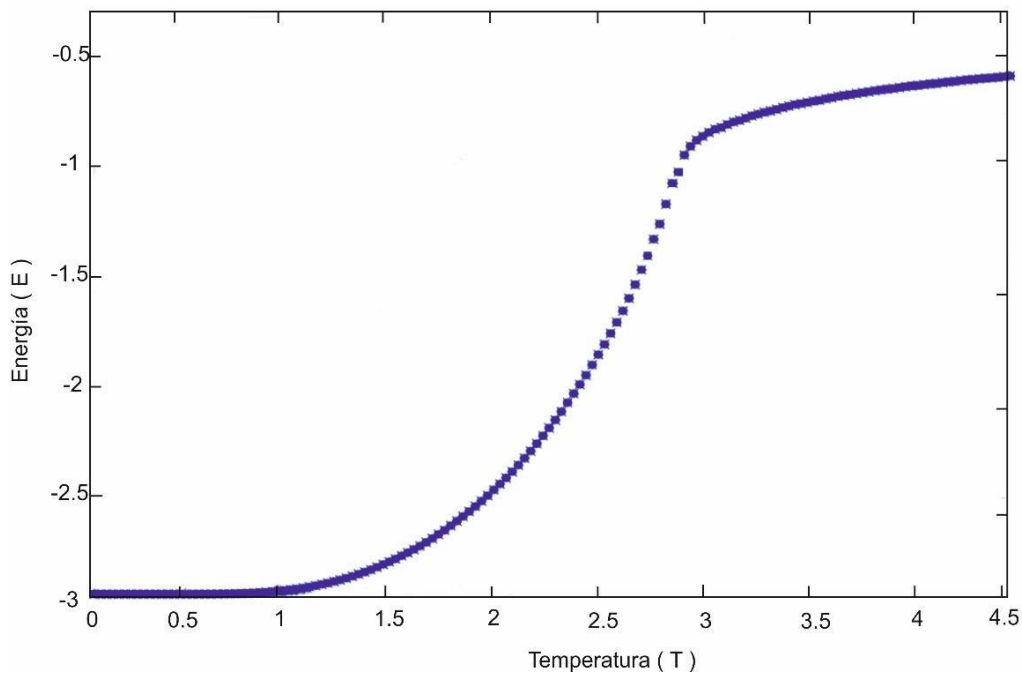
**Figura 5.8.** Esquema de la red de spines, de los vecinos próximos.

En estas ideas de transición por ejemplo si  $S$  originalmente tiene  $+1$ , este puede realizar una transición al valor  $0$  o  $-1$ , dependiendo de la probabilidad a efectuar en una u otra transición, en el algoritmo se ha introducido una condición de  $0.5$  se efectúa una transición y en caso contrario se realiza la transición restante, una vez definida la transición se realizara una diferencia energética de acuerdo a las transiciones del momento por ellos el código completo se ha realizado en FORTRAN 90, y se encuentra en el anexo 2.4.

### 5.2.3 Resultados mediante el método Monte Carlo

Los resultados, que exponen a continuación es corrida bajo el entorno de Windows 8.1, memoria RAM 12 Gb, por lo que se ha mencionado en la sección anterior que el método Montecarlo su fortaleza se basa en la cantidad de iteraciones, dado que mi computador soportó hasta una celda 50x50, siendo la óptima celda de la matriz ( $L = 40 \times 40$ ) y el tiempo de corrida de entre 20 a 25 minutos.

Pasos para equilibrar el sistema cada 1000 pasos, y el campo magnético externo  $H=0$ , la constante de acoplamiento  $J=1$  y la constante de Boltzmann  $K=1$ .



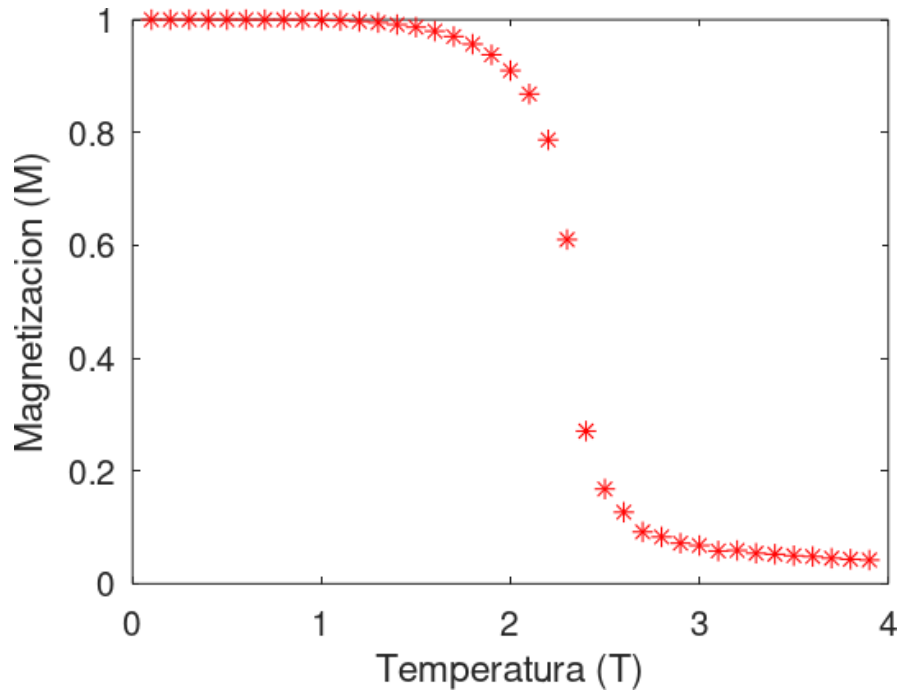
18

**Figura 5.9**

**Figura 5.9.** Energía media en función de la temperatura.

En la figura 5.9 podemos ver que la energía media en función de la temperatura en unidades arbitrarias, se considera que la mínima energía se da para la configuración inicial, y se observa que la energía comienza a subir hasta llegar a un próximo valor a cero y luego la energía media

tiende a estabilizarse a una constante, por tanto, es un primer indicio de la existencia de una temperatura crítica, donde el sistema experimentará un cambio de fase.

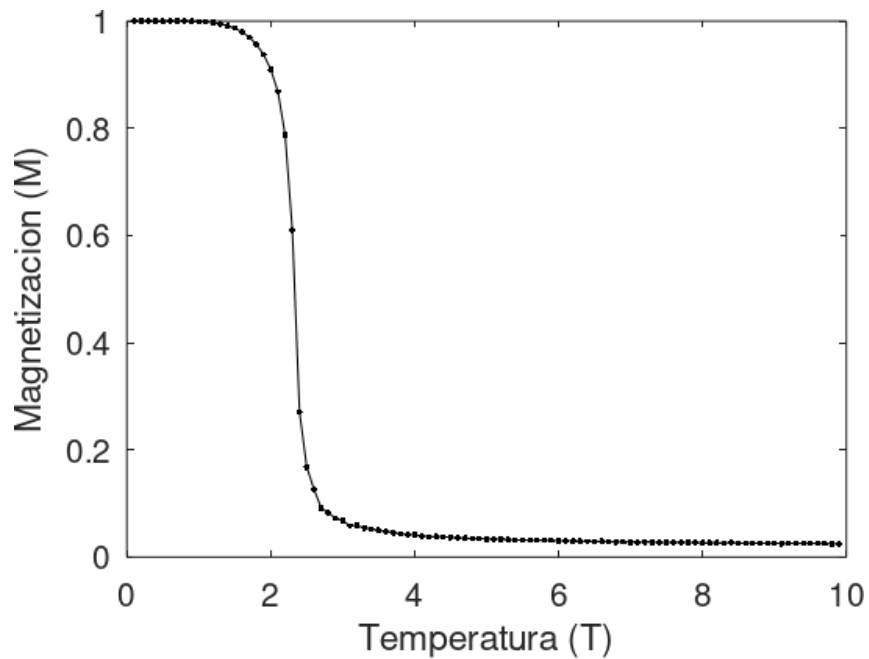


**Figura 5.10**

**Figura 5.10:** Magnetización media en función de la temperatura.

19

En la figura 5.9, se nota para magnetización que sería la magnetización media  $\langle M \rangle$  comienza en el valor 1 y luego para una cierta temperatura decae a aproximadamente a cero, para lo cual, si realmente decae a cero se amplía el rango de temperatura para asegurarnos, ver figura 5.11. Por lo que se deduce que para un  $T < T_c$ , el sistema presenta una magnetización espontánea  $\langle M \rangle \neq 0$ . Para un  $T > T_c$ , la media es cero. Es decir, se observa que pasa repentinamente de una fase  $\langle M \rangle \neq 0$  a una fase  $\langle M \rangle = 0$ , para una temperatura crítica.

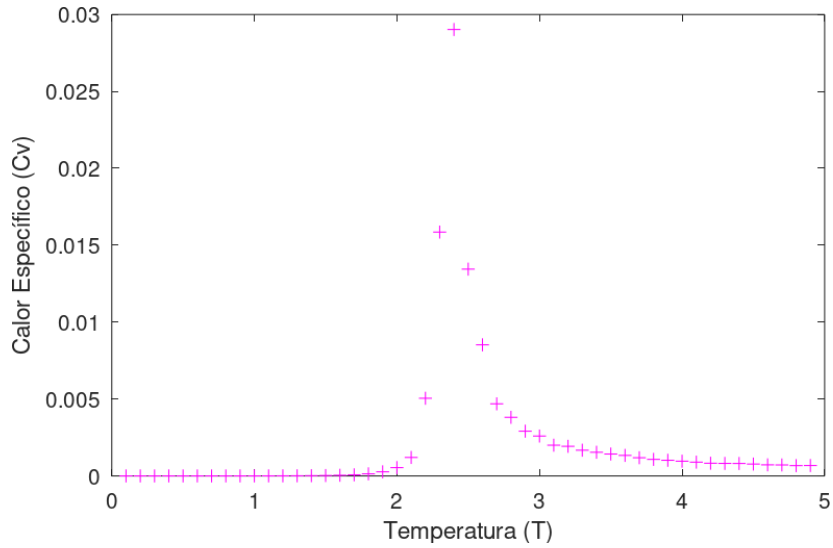


20

**Figura 5.11**

**Figura 5.11.** Magnetización media en función de la temperatura. Se aproxima a cero, la magnetización para temperaturas mayores a la temperatura crítica.

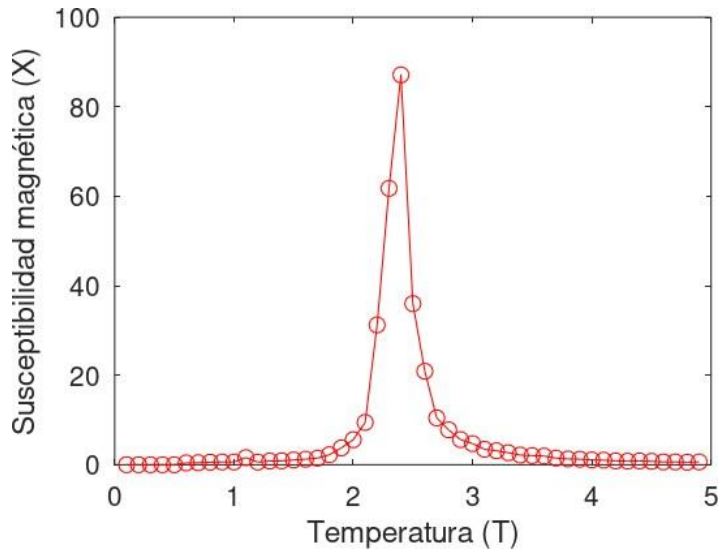
En la **figura 5.12** y **figura 5.13**, el calor específico  $C_v$ , y la susceptibilidad magnética( $\chi$ ) en función de la temperatura diverge la temperatura crítica, en el límite termodinámico, considérese que este resultado es para el campo externo igual a  $H=0$ .



21

**Figura 5.12**

**Figura 5.12.** Calor específico como función de la temperatura.



22

**Figura 5.13**

**Figura 5.13.** Susceptibilidad magnética como función de la temperatura.

Por lo observado en los resultados, salvo para casos en los que la temperatura sea próxima a la temperatura de Curie, un material ferromagnético se caracteriza por poseer un vector imanación constante en módulo, con independencia de la posición en el material o del campo aplicado. Por ello los cambios de una celda a otra en el vector imanación pueden considerarse tan sólo como cambios de orientación. Este tipo de cálculos es tanto más preciso cuanto más

se aproxime el número de celdas al número de átomos magnéticos del material, **(Murillo Pariona, 2019)**.

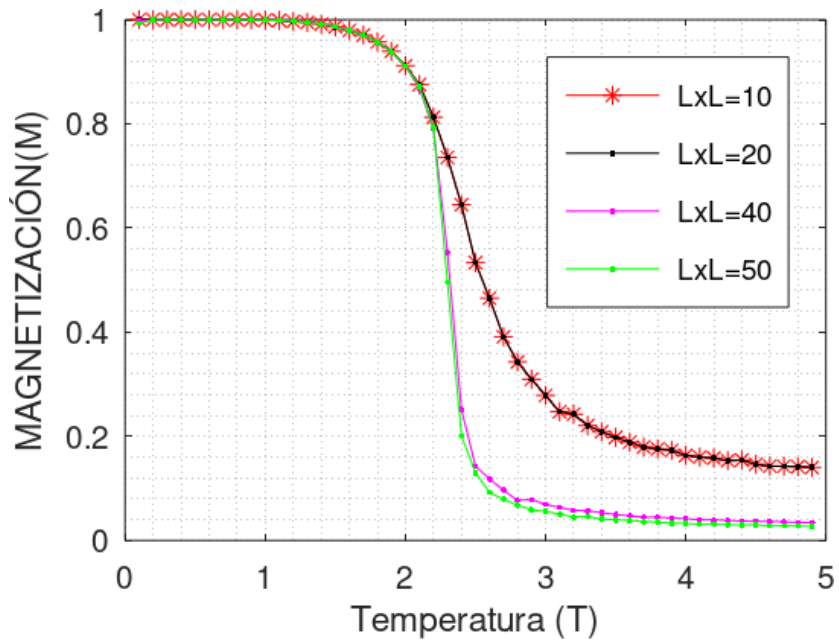
## VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

### 6.1 Contrastación de hipótesis con los resultados

Dado, que el algoritmo diseñado, ha permitido encontrar resultados gráficos compatibles con la mayoría de publicaciones, teniendo entre ellas **Brooks-Bartlett Marion (2015)**; **Creutz (1983)**; **Gelover Santiago (2005)**, **Murillo Pariona (2019)**, **Ramirez et al. (2011)**; **Zegarra Borrero y Loro Ramirez (2013)** y entre otros, por lo que, el método y la forma de implementación han sido satisfactorios para obtener los resultados propuesto, dentro de ese contexto es necesario señalar, que el algoritmo completo de Metrópolis para simular un sistema a temperatura para diferentes casos, en función como va variando los parámetros físicos, como la magnetización, calor específicos y la susceptibilidad magnética son importantes para establecer el comportamiento de un material ferromagnético.

Por otro lado, la propuesta de metrópolis de establecer ciertas reglas como si el cambio de energía es menor que cero, se acepta siempre, y si es mayor que cero se acepta con cierta probabilidad de comportamiento exponencial y es generado dicho proceso por un generador que en nuestro caso, probamos con dos generadores diferentes con el RAN0 de las recetas numéricas de FORTRAN y el otro de **MERSENNE TWISTER** descrito en el apartado anterior por lo que, se llega a una conclusión que el generador de números pseudoaleatorios es importante para la implementación con el método Montecarlo, y se probó para tamaños de celda  $L \times L = 10$ ;  $L = 20 \times 20$ ;  $L = 40 \times 40$ ;  $L = 50 \times 50$  y aquí en la **Figura 6.1** se observa que las aproximaciones son mejores cuanto mayor es la celda.



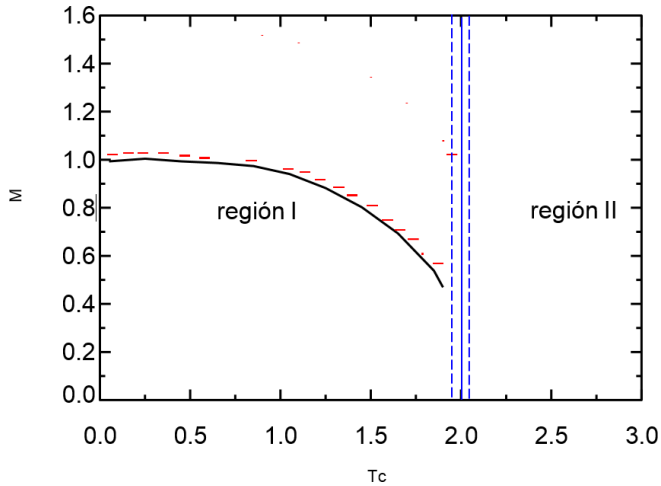


23

**Figura 6.1**

**Figura 6.1.** Magnetización versus temperatura, para diferentes celdas o retículas.

Los resultados teóricos obtenidos por Onsager, según la **ecuación 13** es 2.2691, tal que según la **figura 6.2**, se puede apreciar claramente la transición de fase entre la región I y la región II, por tanto, en la figura 6.1, es compatible con las transiciones de fase propuestos desde el punto de vista teórica.

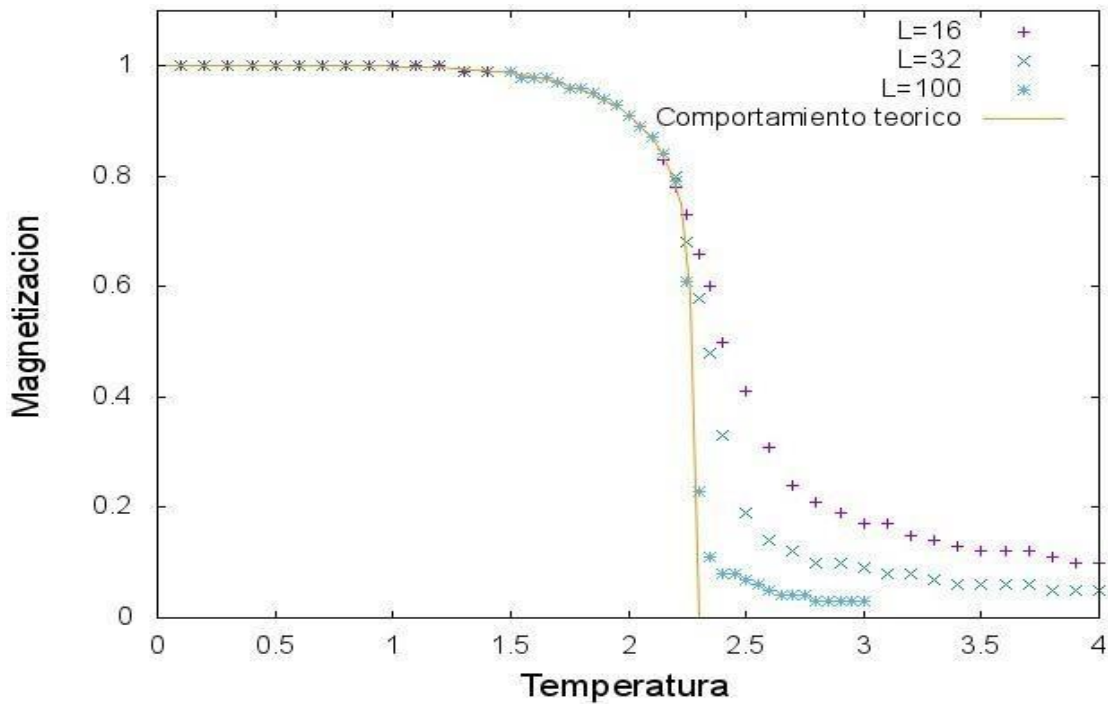


24

**Figura 6.2**

**Figura 6.2.** Transiciones de fase entre región I y II. (Creutz, M, 1983).

**Garcia A et al. (2018)**, obtuvieron mediante su propia simulación utilizando su propia implementación que después del tiempo de termalización, cuyos valores fluctúan alrededor de cierto valor, para  $L \times L = 16$ ,  $L \times L = 32$  y  $L \times L = 100$ .



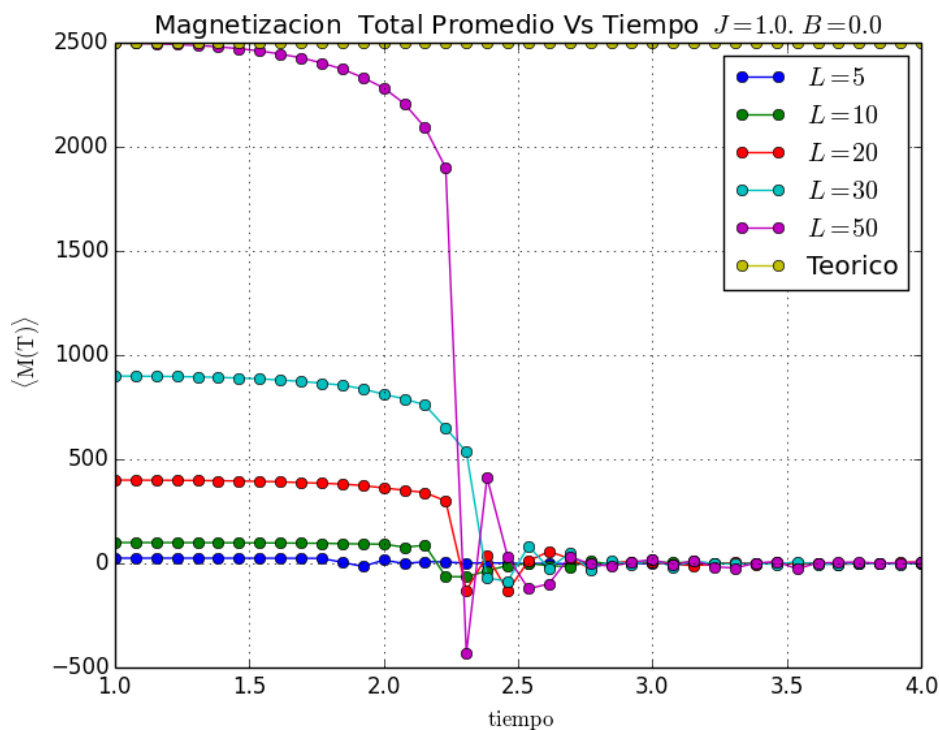
25

**Figura 6.3**

**Figura 6.3.** Magnetización en función de la temperatura obtenida **Garcia A et al. (2018)**

En nuestro caso se obtuvo el mismo comportamiento obtenida por **García et al. 2018**, por lo que el método es valido y funciona dentro los parámetros establecidos.

Comparado con los resultados obtenidos en investigaciones como, **Morgado M. (2016)**, presentan Magnetización Total Promedio en función de la temperatura, para distintos valores de la retícula o celdas y con aproximadamente de 4 horas de tiempo de cómputo, **ver figura 6.4.**

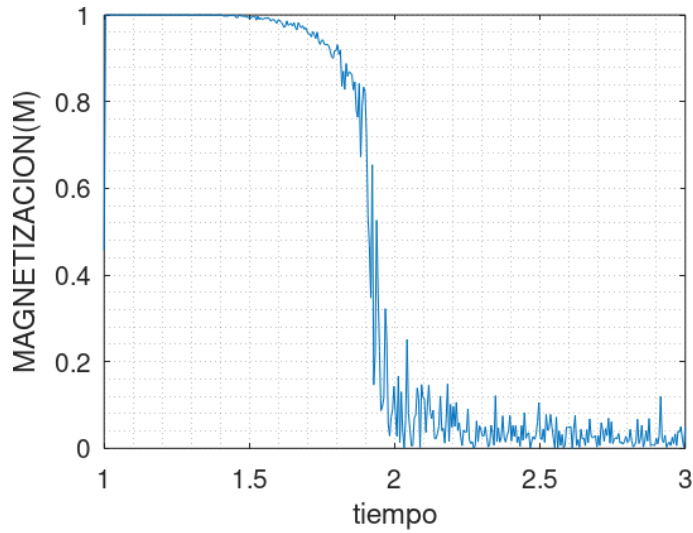


26

**Figura 6.4**

**Figura 6.4.** Magnetización en función del tiempo. (Morgado 2016).

Como se puede observar en la **figura 6.5**, lo obtenido en esta tesis, y la figura 6.4 de **Morgano 2016**, tiene el mismo comportamiento, con la unica diferencia en mi resultado esta normalizado para no tener numeros grandes pero el comportamiento es el mismo y se asemejan los en cuanto al comportamiento y valores.



**Figura 6.5**

**Figura 6.5.** Magnetización en función del tiempo.

27

En cuanto a la comparación de valores podemos ver en la tabla obtenido en esta tesis y los valores obtenidos por Onsager.

**Tabla 6.1.** Valores obtenidos en esta tesis y los resultados teóricos obtenidos por Onsager.

Las temperaturas críticas en el cambio de fase.	<b>Magnetización</b>	<b>Susceptibilidad</b>	<b>Calor específico</b>
En esta tesis	2.2578	2.2345	2.5248
Teórico por Onsager	2.2691	2.2691	2.27
Teoría del valor promedio	4.025	----	---

**3 Tabla 6.1**

Si bien la teoría del valor medio difiere del resultado exacto, pero la tendencia nos dice que existe una transición de fase al variar la temperatura en un material ferromagnético, mientras el método Montecarlo por lo visto y contrastado con otros autores da muy buenos resultados,

por tanto, esta implementación y el programa permitirá en futuros estudios hacer uso para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos.

De la **Tabla 6.1**, podemos inferir que se asemejan con los resultados teóricos comprobándose que hay una transición de fase en la zona  $2.2 < T < 2.4$ , además en la zona crítica hemos cogido saltos en las temperaturas mas cortos para obtener mayor densidad de puntos que permite un mejor entendimiento. Si bien la magnetización es simulada (en unidades arbitrarias) y se ajusta perfectamente a la curva teórica por de debajo de la temperatura crítica y por encima de la curva obtenida, por lo también se observa influye el número de la retícula o malla que se toma. Por otro lado, se ve también el cambio brusco que está íntimamente relacionado con la transición de fase, provocando la divergencia en la susceptibilidad en esa zona. Por otro lado, el calor específico también se ajusta considerablemente bien a la curva teórica, y se observa la divergencia con el cambio brusco de la energía.

## VII. CONCLUSIONES

De los resultados obtenidos en el presente trabajo de investigación: **Implementación de una Simulación Montecarlo basado en el modelo Ising con enfoque en las transiciones de fase en materiales ferromagnéticos**, se establecen las siguientes conclusiones:

- Se ha implementado de manera satisfactoria en FORTRAN 90, Un programa que permite simular las transiciones de fase de materiales ferromagnéticos, basado en el modelo Ising, obteniéndose resultados muy cercanos a valores propuestos por Onsager, de manera teórica.
- El método Montecarlo, mediante el algoritmo de metrópolis tiene su base en la ley de grandes números, mientras más grande es la muestra mejor se aproxima los valores al valor teórico, por lo que en esta tesis se ha realizado todos los resultados en esta tesis con retícula de  $L \times L = 40 \times 40$  y  $L \times L = 50$ , pero el programa fácilmente permite cambiar el doble tamaño, pero con tiempo de simulado es mucho mayor, por lo que requiere mayor tiempo computacional.
- La simulación utilizando el algoritmo de Metrópolis, un sistema de spines por medio del modelo de Ising con interacción de primeros vecinos y notamos esencialmente que si el sistema se encuentra en ausencia de un campo magnético externo, existe una temperatura crítica  $T_c$  asociada a la dimensión del arreglo. Esta temperatura crítica nos habla acerca de un cambio de fase, donde para  $T < T_c$ , el sistema posee una magnetización espontanea. Para valores  $T > T_c$ , la magnetización media es nula, es decir que los spines del arreglo se hayan totalmente desordenados los unos con los otros.
- Los resultados numéricos presentados, el programa implementado permite visualizar algunos aspectos cualitativos del comportamiento cerca y lejos del punto crítico tales como fluctuaciones, formación de dominios, distancias de correlación, la aparición de una transición de fase.

## VIII. RECOMENDACIONES

De la investigación realizada, se desprende las siguientes recomendaciones adecuadas:

- Se recomienda tener un buen generador de números pseudoaleatorios que permita tener una distribución uniforme, de valores con periodo lo más grande posible y que su generación sea independiente en cada ensayo, para esta tesis en el caso de RAN0 de las rectas numéricas de FORTRAN 77, da buenos resultados, para la semilla inicial se ha tomado un numero entero impar, a partir de la fecha del computador en ese instante, lo cual da la confiabilidad en elección de la semilla.
- La elección de FORTRAN se debe a la velocidad con se ejecuta el proceso del algoritmo implementado, lo cual en otros lenguajes programación tarda más tiempo, también depende del computador, todos los resultados han sido obtenidos con un computador portátil de 12 GB de memoria RAM, con computadores superiores permitirá realizar ejecuciones en menor tiempo y un numero de malla o retícula superior sin ninguna dificultad.
- El algoritmo implementado puede permitir a realizar simulaciones mas realistas y contrastar con magnitudes medibles en materiales ferromagnéticos como la magnetización, calor especifico, y la susceptibilidad magnética, en función de la temperatura.
- En esta tesis no se consideró la presencia del campo externo lo cual el algoritmo soportaría sin ningún inconveniente, lo único se tendría que definir la forma del proceso de campo externo y por tanto, el programa se podría hacer extensivo para determinar otros parámetros físicos.

## IX. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- **Baglietto, G. (2011).** Transiciones de fase en sistemas de partículas autopropulsadas, Tesis doctoral (2011).
- **Brooks-Bartlett Marion E. (2015).** Numerical investigations of classical spin models: the impact of lattice geometry, confinement, and lon-range interactions. THESIS Doctor en philosophy. University College London.
- **Creutz, M., (1983).**Microcanonical Monte Carlo Simulation, Physical Review Letters, Vol. 50, No 19(1983).
- **De la Espriella N. y Casiano G. R. y Ortega C. (2012).** Efectos de los campos cristalinos en un ferromagnetismo del modelo de Ising Mixto Bidimensional. Información.
- **Garcia A. Manzano H. y Etxebarriaga I. (2018).** Una revisión del modelo Ising y aplicación en la sociología a través del Modelo de Sznajd. Leioa. Universidad del país Vasco. Trabajo de fin de grado.
- Tecnologica vol. 23(5,125-134). Doi : 10.4067/s07-18-07642012000500013.
- **Gelover Santiago A. (2005).** Simulation del modelo Ising con el metodo Montecarlo. Facultad de ciencias, UNAM, ISBN:970-32-2869-0.
- **Guisoni N., Loscar, E. S., y Albano, E. V. (2011)** Phase diagram and critical behavior of a forest-firemodel in a gradient of immunity Physical Review E 83, 011125 (2011).
- **NUMERICAL RECIPES FORTRAN 77 (1992).** The art of Scientific Computing. Isbn: 0-521-43064-X.
- **Hjorth-Jensen (2003).** Computational physics. Hjorth-Jensen, M. University of Oslo



- **Kobe S. (2000)** Ernst Ising 1900-1998, Bazilian Journal of Physics, vol.30, no. 4, December.
- **Matsumoto, M.; Nishimura, T. (1998)**.Mersenne twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator. ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation (en inglés) 8 (1): 3-30. doi:10.1145/272991.272995
- **Morgado M. (2016)**. Modelo Ising. Univerisidad simon bolivar. 08-10779.
- **Klaus Pin (1995)**. Montecarlo Studies of Ising Model Inteffases and Solid-On-Solid Models. Thesis. Westfalischen Wilhelms-Universitat Musnter.
- **Metropolis N., A.W. Rosenbluth, A. H. Teller, M. N. Rosenbluth, and E. Teller, (1953)**. Equation os state calculations by fast computing machines., Journal of Chemical Physics 21 (1953), 1087.
- **Mellor Vincent A. (2011)**. Numerical Simulations of the Ising ,Model on the Union Jack Lattice. arXvi: 1101.5015v1 [math-ph] 26 Jan.
- **Morón, M. Mora. (2003)** Journal of Materials Processing Technology 143–144 (2003) 118–121
- **Muglia J. (2011)**. Simulaciones computacionales del modelo Ising con gradiente térmico. Universidad Nacional de la Plata.
- **Murillo Pariona D. (2019)**. Estudio de la competicion entre interacciones de corto largo alcance en el modelo de Blume Capel de espin 5/2. Tesis Maestria. UNMSM. Lima-Peru.
- **Nakamura Y, Tucker J.W. (2002)**. Montecarlo study mixed spin-1 and spin-3/2 Ising Ferromagnetic. IEEE Transactions on Magnetics.
- **Ramirez P.; Moron C.; Garcia A.(2011)** Modelo de Ising en 3-D. Aplicaciones a sensors Magneticos. Congreso de inovaciones Tecnologicas en Edificación CITE.
- **Rubio Puzzo D.E, M. L., y Saracco, G. P. (2011)**. Study of Phase Transitions from Short-Time Non-Equilibrium Behaviour, Reports on Progress in Physics 74 (2011).
- **Zegarra Borrero y Loro Ramirez (2013)**. Analisis de Transciones de fase en un Ferromagneto ideal aplicando el metodo Montecarlo a los Modelos de Ising y Heisenberg en 2 y 3 Dimensiones. Revista de la Facultad de Ciencias de la UNI, REVCUNI 16(1)(2013) 46-51.

# **ANEXOS**

## **ANEXO N° 1**

PROBLEMAS	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	METODOLOGÍA
<p><b>Determinación del problema</b></p> <p>Los modelos Ising y de Heisenberg son adecuados para tratar los fenómenos de transiciones de fase en ferromagnetismo. Si bien existen muchos métodos de estudios al respecto, no existe un algoritmo claro que permita entender a profundidad las transiciones en estos materiales.</p> <p>En nuestra propuesta se realizarán modelizaciones y simulaciones computacionales para diferentes parámetros que permitan entender los procesos fenomenológicos y comparar estos con los resultados teóricos para algunas predicciones. La implementación del algoritmo permitirá encontrar y construir diagramas de fase de las principales cantidades termodinámicas de interés.</p> <p><b>Formulación del problema</b></p> <p><b>Problema general</b></p> <p>¿Es posible implementar una simulación Montecarlo basado en el modelo Ising que permita obtener transiciones de fase en materiales ferromagnéticos?</p> <p><b>Problema específico</b></p> <p>- ¿Es posible obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la Magnetización en función de la temperatura?</p> <p>- ¿Es posible obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento del calor específico en función de la temperatura?</p> <p>- ¿Es posible obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura?</p> <p>- ¿Es posible obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la energía media en función de la temperatura?</p>	<p><b>Objetivo General</b></p> <p>Implementar una simulación Montecarlo basado en el modelo Ising que permita obtener los parámetros de las propiedades magnéticas en materiales ferromagnéticos.</p> <p><b>Objetivos específicos</b></p> <p>- Obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la Magnetización en función de la temperatura.</p> <p>- Obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento del calor específico en función de la temperatura.</p> <p>- Obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura.</p> <p>- Obtener por simulación Montecarlo basado en el modelo Ising el comportamiento de la energía media en función de la temperatura.</p>	<p><b>Hipótesis General</b></p> <p>Implementar un proceso de simulación Montecarlo basado en el modelo Ising que permitirá obtener transiciones de fase en materiales ferromagnéticos.</p> <p><b>Hipótesis Específicas</b></p> <p>- La simulación Montecarlo basado en el modelo Ising permitirá la Magnetización en función de la temperatura.</p> <p>- La simulación Montecarlo basado en el modelo Ising permitirá del calor específico en función de la temperatura.</p> <p>- La simulación Montecarlo basado en el modelo Ising permitirá de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura.</p> <p>- La simulación Montecarlo basado en el modelo Ising permitirá de la energía media en función de la temperatura.</p>	<p><b>Tipos de investigación</b></p> <p>La investigación es de enfoque descriptivo.</p> <p><b>Diseño de la investigación</b></p> <p>La investigación responde a un método deductivo, desde que se toma como referencia todos los trabajos realizados de comprensión de conceptos matemáticos y físicos, y el planteamiento del algoritmo basado en el método Montecarlo.</p> <p><b>Población y muestras</b></p> <p>Dada las características de la investigación no corresponde población y muestra toda vez que es una investigación de características de nivel descriptiva.</p> <p><b>Técnicas e Instrumentos</b></p> <p>A partir de la simulación permite encontrar comportamientos de parámetros físicos que serán contrastados con resultados teóricos para lo cual se trabaja bajo el entorno Windows y el programa FORTRAN</p>

# MATRIZ DE CONSISTENCIA

## ANEXO N° 2

### ANEXO 2.0: MAGNETIZACIÓN EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA EN FORTRAN

```
PROGRAM NEWTON_NL

!! NOMBRE: F. SALAZAR Y J.TORDOCILLO

IMPLICIT NONE

INTEGER :: I,J,N,N1
DOUBLE PRECISION :: X,F,TOL,X0,T,DF

OPEN (20,FILE='NEWTON01.TXT',STATUS='UNKNOWN',ACTION='WRITE')

WRITE(*,50,ADVANCE='NO')'INGRESE EL VALOR DE N'

50 FORMAT(A)
READ*,N !100 TEMP. DIFERENTE
T=0.01 ! T0 (C)
DO J=1,N
  I=1
  X0=1.0
  TOL=1.0E-9

  N1=30 !

  DO WHILE(I<=N1) !EC. NO LINEAL
    X=X0-(F(X0,T)/DF(X0,T))
    !PRINT*,X
    IF(ABS(X-X0)<TOL) THEN

      WRITE(20,15)T,X
      EXIT
    END IF
    I=I+1
    X0=X
  END DO
  T=T+0.05
END DO

15 FORMAT(3X,2F20.8)

END PROGRAM NEWTON_NL
```

```
!%%%%%%%%%%55
!%%%%%%%%%
```

```

FUNCTION F(X,T)
IMPLICIT NONE
!-----
! LA FUNCION F
!-----
DOUBLE PRECISION :: X,F,T
F=X-TANH(4*X/T)
RETURN
END

FUNCTION DF(X,T)
IMPLICIT NONE
!-----
! LA FUNCION DF
!-----
DOUBLE PRECISION :: X,DF,T
DF=1-(4.0/T)*(1-TANH(4.0*X/T)*TANH(4.0*X/T))
RETURN
END

```

## ANEXO 2.1: GENERADOR INTRINSECO DE LAS LIBRERIAS DE FORTRAN

```
PROGRAM GENERADOR_01
IMPLICIT NONE
!PROPOSITO: GENERADOR INTRINSECO
!AUTOR : F. SALAZAR y J.TORDOCILLO
!PASO      01:ASIGNACION DE VARIABLES
REAL:: R
INTEGER:: SEED,N,I
INTEGER, DIMENSION (10)::T
!PASO 2: LLAMAR LAS RUTINAS DE FORTRAN
CALL DATE_AND_TIME(VALUE=T)
SEED= T(1)+70*(T(2)+12*(T(3)+31*(T(4)+23*(T(5)+59*T(6))))
IF(MOD(SEED,2)==0) THEN
SEED=SEED-1
END IF
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!PASO 03: ENTRADA DE DATOS
WRITE(*,10,ADVANCE='NO')NUMERO DE ITERACIONES:'
READ*,N
10 FORMAT(A)
!PASO 04: SALIDA DE DATOS POR ARCHIVO
OPEN(20,FILE='GENERADOR_01.TXT',STATUS='UNKNOWN',ACTION='WRITE')
CALL RANDOM_SEED(SEED)
DO I=1,N
    CALL RANDOM_NUMBER(R)
WRITE(20,100) R
END DO
100 FORMAT(3X,F10.8)
END PROGRAM GENERADOR_01
```

## ANEXO 2.2: GENERADOR RAN0 DE LAS RECETAS NUMERICA DE FORTRAN 77

! Basado en el algoritmo Park y Miller.

```
!  
!-----  
!LLAMANDO A LA FUNCION RAN0  
!-----
```

FUNCTION RAN0(SEED)

! Funcion generadora de un numero aleatorio en [0,1]

!  $x(i+1)=a*x(i) \bmod c$  con  $a=7^{**} 5$  y

!  $c=2^{**}31-1$ . aqui la semilla es una variable global

!

IMPLICIT NONE

INTEGER :: H, L, T, A, C, Q, R, SEED

DATA A/16807/, C/2147483647/, Q/127773/, R/2836/

REAL :: RAN0

!

H = SEED/Q

L = MOD(SEED, Q)

T = A\*L - R\*H

IF (T .GT. 0) THEN

SEED = T

ELSE

SEED = C + T

END IF

RAN0 = SEED/FLOAT(C)

RETURN

END





```

save mag01
!           mag01(x) = x * MATA for x=0,1
!
TSHFTU(y)=ishft(y,-11)
TSHFTS(y)=ishft(y,7)
TSHFTT(y)=ishft(y,15)
TSHFTL(y)=ishft(y,-18)
!
if(mti.ge.N) then
!           generate N words at one time
if(mti.eq.N+1) then
!           if sgrnd() has not been called,
call sgrnd(4357)
!           a default initial seed is used
endif
!
do 1000 kk=0,N-M-1
y=ior(iand(mt(kk),UMASK),iand(mt(kk+1),LMASK))
mt(kk)=ieor(ieor(mt(kk+M),ishft(y,-1)),mag01(iand(y,1)))
1000 continue
do 1100 kk=N-M,N-2
y=ior(iand(mt(kk),UMASK),iand(mt(kk+1),LMASK))
mt(kk)=ieor(ieor(mt(kk+(M-N)),ishft(y,-1)),mag01(iand(y,1)))
1100 continue
y=ior(iand(mt(N-1),UMASK),iand(mt(0),LMASK))
mt(N-1)=ieor(ieor(mt(M-1),ishft(y,-1)),mag01(iand(y,1)))
mti = 0
endif
!
y=mt(mti)
mti=mti+1
y=ieor(y,TSHFTU(y))
y=ieor(y,iand(TSHFTS(y),TMASKB))
y=ieor(y,iand(TSHFTT(y),TMASKC))
y=ieor(y,TSHFTL(y))
!
if(y.lt.0) then
grnd=(dble(y)+2.0d0**32)/(2.0d0**32-1.0d0)
else
grnd=dble(y)/(2.0d0**32-1.0d0)
endif
!
return
end

```

## ANEXO 2.4: PROGRAMA MONTECARLO DEL MODELO ISING EN 2D

PROGRAM ISING2D

!! NOMBRE:F. Salazar

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)

PARAMETER (L=40,N=L\*L)

INTEGER:: S(N),N1(N),N2(N),N3(N),N4(N)

DIMENSION H(-4:4)

DATA M,M0,MC/8192,1000,1/

CALL sgrnd(4357)

OPEN (20,FILE='ISING\_T1.TXT',STATUS='UNKNOWN',ACTION='WRITE')

CALL MATRIZ(N1,N2,N3,N4,L)

DO I=1,N  
IF(grnd() $<$ 0.5) THEN  
S(I)=+1

ELSE

S(I)=-1

END IF

END DO

T=0.1

DO WHILE (T $\leq$ 4.0)

DO J=-4,4,2

H(J)=MIN(1.0,EXP(-2\*J/T))

END DO

DO IJ=1,M0\*N !TERMALIZACION

I=INT(grnd()\*N)+1

IB=S(I)\*(S(N1(I))+S(N2(I))+S(N3(I))+S(N4(I)))

IF(RAND() $<$ H(IB)) S(I)=-S(I)

END DO

C=0

RM=0

RM2=0

RM1=REAL(ABS(SUM(S)))/N

DO IM=1,M

DO IJ=1,MC\*N

I=INT(grnd()\*N)+1

IB=S(I)\*(S(N1(I))+S(N2(I))+S(N3(I))+S(N4(I)))

IF(grnd() $<$ H(IB)) S(I)=-S(I)

END DO

RM0=REAL(ABS(SUM(S)))/N

WRITE(21,\*)RM0

RM=RM+RM0

RM2=RM2+RM0\*RM0

C=C+RM0\*RM1

```

RM1=RM0
END DO

RM=RM/REAL(M)
RM2=RM2/REAL(M)-RM*RM
C1=REAL(C)/REAL(M)

IF (RM2==0.0) RM2=0.0000000000001
C=(C1-RM*RM)/RM2

IF(C.NE.1.0) TAU=C/(1.0D0-C)
!ERROR=SQRT(RM2*(2*TAU+1)/REAL(M))
WRITE(20,15)T,RM !,RM2 ,ERROR ,MC*TAU,C
T=T+0.1
END DO
15 FORMAT(3X,2(F20.8,1X))

END PROGRAM ISING2D

!*****
!*****

SUBROUTINE MATRIZ(N1,N2,N3,N4,L)
DIMENSION N1(L*L),N2(L*L),N3(L*L),N4(L*L)
DO IX=1,L
DO IY=1,L
I=(IY-1)*L+IX
IX1=IX+1
IF (IX1.EQ.L+1) IX1=1
N1(I)=(IY-1)*L+IX1
IY2=IY+1
IF(IY2.EQ.L+1)IY2=1
N2(I)=(IY2-1)*L+IX
IX3=IX-1
IF (IX3.EQ.0)IX3=L
N3(I)=(IY-1)*L+IX3
IY4=IY-1
IF(IY4.EQ.0)IY4=L
N4(I)=(IY4-1)*L+IX
END DO
END DO
END SUBROUTINE MATRIZ

```