

UN “ARTE” PARA CONECTAR LO QUE PODEMOS VER CON LO MICRO QUE NO ALCANZAMOS A VER

Las características que podemos ver y medir de un cuerpo como, por ejemplo, su temperatura, la dureza de una barra de metal, la capacidad de esparcirse de un líquido o las propiedades magnéticas de un imán, provienen del ordenamiento y movimiento de los elementos que componen la barra de metal, líquido e imán a nivel microscópico. Más aún, existe “un arte” llamado simulaciones Monte Carlo que permite realizar en la práctica esta conexión mediante el uso de computadores.

• **Alejandro Riveros Rodríguez**
Doctor en Ciencias con mención en Física.

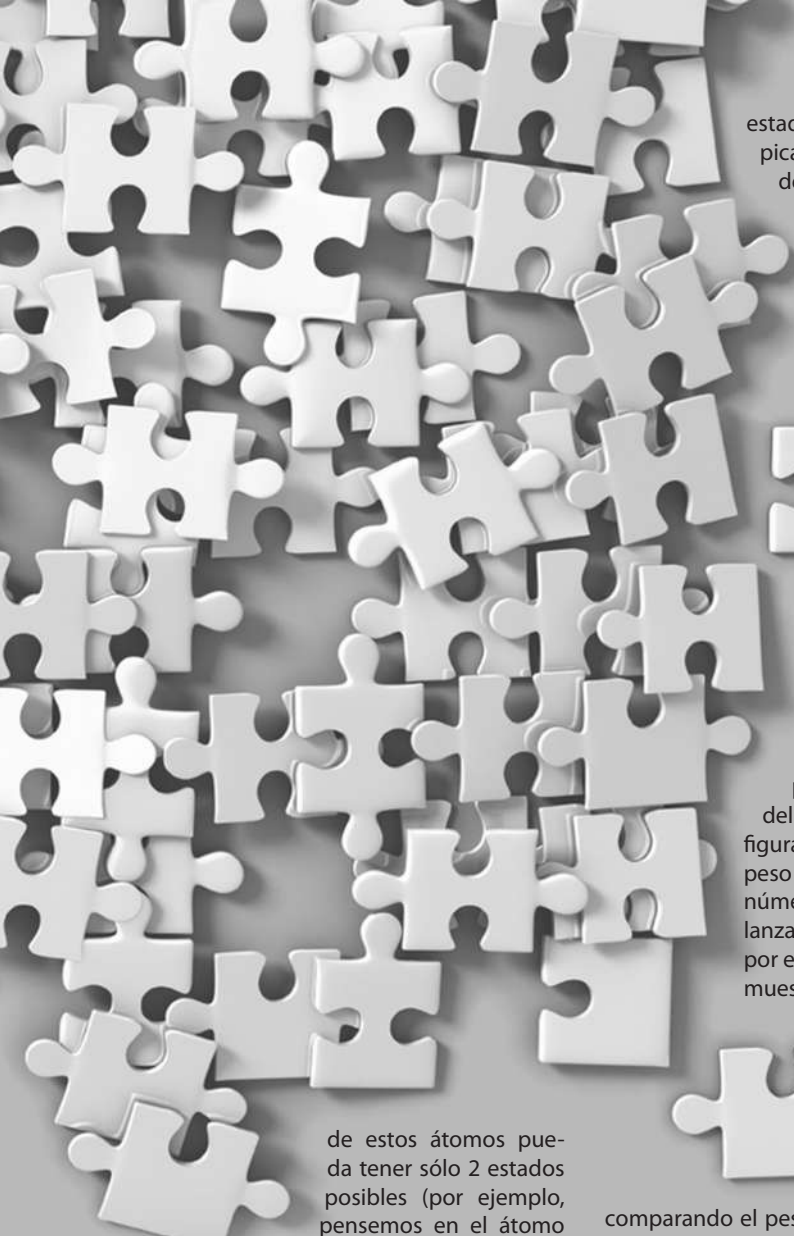
Tal vez nos pueda sorprender saber que las características que vemos de un cuerpo en nuestra vida diaria se deben al ordenamiento y movimiento de los elementos que lo componen. En efecto, todo cuerpo, ya sea ser vivo u objeto, está formado por un número muy grande, ¡inimaginablemente grande! de moléculas y átomos y, precisamente, la forma como se ubican estos elementos determina sus características y propiedades. Por ejemplo, el carácter rígido y duro de una piedra mientras que la capacidad de esparcirse de un líquido al derramarse se debe al orden compacto de los átomos en la piedra y del desorden y mayor espacio entre los átomos del líquido, respectivamente. Otro bonito ejemplo de propiedades cotidianas para nosotros, es la temperatura de un cuerpo; en efecto, mientras mayor sea la agitación y movimiento de sus átomos y moléculas, mayor será su temperatura. Por eso al calentar un cuerpo sólido, por ejemplo, una barra de metal, no es de extrañar que si la temperatura es lo suficientemente alta podamos romper el orden compacto de su estructura y fundirlo a estado líquido o bien, al calentar el agua para nuestro café o té del desayuno se produzca vapor de agua. Por lo tanto, podemos relacionar la temperatura de un cuerpo con el orden o desorden de los elementos que lo conforman. Mientras mayor sea el desorden y movimiento de los elementos microscópicos, mayor será la temperatura del cuerpo. En cambio, mientras mayor sea el orden microscópico de sus elementos, menor será su temperatura. Sin embargo, por supuesto no todos los cuerpos presentan la misma facilidad para cambiar su nivel de orden molecular cuando aumenta su temperatura. En efecto es mucho más sencillo (requiere menos calor) convertir hielo en agua que fundir el metal. Más aún, la cantidad de material también es importante, por ejemplo, es más fácil calentar una pequeña cantidad de agua (por ejemplo, en una taza) que calentar el agua de una piscina.

Por otro lado, la temperatura de un cuerpo no solo afecta el orden en que se ubican sus elementos, sino también afecta las propie-

dades propias de los átomos del cuerpo como por ejemplo sus propiedades eléctricas y magnéticas. Por esto, la capacidad que tienen los imanes para adherirse a la cubierta del refrigerador se debe al orden de la información magnética de los elementos que forman los magnetos; por lo que no es de extrañar que si calentamos excesivamente los magnetos estos pierdan su capacidad magnética y no se puedan adherir a la cubierta del refrigerador (por ejemplo, el hierro pierde su capacidad magnética a temperaturas sobre 1.000°C). Por lo tanto, la propiedad magnética de los imanes se debe al ordenamiento de la información magnética inherente a los átomos que lo conforman.

Existe una rama de la física llamada mecánica estadística, que explica y estudia las propiedades de los cuerpos, como por ejemplo la temperatura, la magnetización y la energía (entre otras propiedades) en base a las configuraciones microscópicas del cuerpo. Una configuración microscópica es un posible ordenamiento de los elementos microscópicos que componen el cuerpo que son relevantes para la propiedad física. Debido a que existe un número muy grande de posibles ordenamientos de los elementos microscópicos, se pueden determinar las propiedades físicas de los cuerpos formalmente, usando mecánica estadística realizando promedios sobre todas las configuraciones microscópicas posibles del sistema en estudio.

En este punto seguramente el lector se preguntará ¿Cómo es posible en la práctica tomar en cuenta todas las posibles configuraciones microscópicas si existe un número gigantesco de moléculas y átomos? La verdad es que ¡No es posible!, es imposible en la práctica contabilizar ¡Todas las configuraciones microscópicas!, debido al gigantesco número de elementos microscópicos ¡Sería una locura el solo pensar en tomar en cuenta todas ellas! Aún más, aunque simplifiquemos enormemente un modelo de una estructura atómica con apenas 100 átomos donde cada uno



estadística hay que promediar sobre todas las configuraciones microscópicas, la gran mayoría de ellas no inciden fuertemente y solo un “poco” de ellas son importantes al calcular el promedio. Esto es análogo a calcular el promedio de nuestras notas en un curso en el que participamos. Para el cálculo de la nota final de un curso se promedian las notas obtenidas, no obstante, generalmente algunas evaluaciones tienen mayor porcentaje (peso estadístico) como las pruebas o exámenes respecto a otras evaluaciones de menor porcentaje como tareas. En esta analogía la propiedad física del cuerpo (por ejemplo, la magnetización) juega el rol de la nota final del curso, mientras que las configuraciones microscópicas juegan el rol de todas las evaluaciones.

Por lo tanto, en la práctica para determinar las propiedades macroscópicas como la energía o la magnetización, solo es necesario promediar sobre las configuraciones microscópicas que tienen mayor peso estadístico (las más importantes) para esa propiedad física. Este “arte” se puede hacer mediante un tipo de simulaciones realizadas usando computadores llamadas simulaciones Monte Carlo, generando en la simulación con mayor frecuencia las configuraciones más importantes (de mayor peso estadístico) y no perder tiempo en generar muchas configuraciones microscópicas poco relevantes (de bajo peso estadístico) para la propiedad física del cuerpo o sistema. La aceptación o rechazo de cada una de las configuraciones generadas durante la simulación depende de cuánto sea el peso estadístico de la configuración en comparación a una ruleta para un número aleatorio entre 0 y 1, similar a una decisión del tipo “cara o sello” al lanzar una moneda. Precisamente de ahí proviene el nombre Monte Carlo, por el “casino de Monte-Carlo” del principado de Mónaco. En la figura 1 se muestra esquemáticamente dos configuraciones microscópicas de posibles ordenamientos de momentos magnéticos (información magnética) de un material magnético. A la izquierda todos los momentos (flechas) apuntan en un mismo sentido, en cambio a la derecha algunos momentos (con flechas de color rojo) apuntan en dirección contraria. En una simulación Monte Carlo el paso desde la configuración de la izquierda a la de la derecha es aceptado o rechazado comparando el peso estadístico de esa nueva configuración con un número aleatorio (“cara o sello” para una moneda lanzada al aire).

de estos átomos pueda tener sólo 2 estados posibles (por ejemplo, pensemos en el átomo con un electrón orbitando o sin electrón), existirían 2^{100} posibles configuraciones microscópicas. Si ponemos ese número en la calculadora nos daríamos cuenta de que es un valor aproximadamente igual a $1.000.000 \times 1.000.000 \times 1.000.000 \times 1.000.000 \times 1.000.000$ (¡O sea un número gigantesco!) y aún si usáramos el computador más rápido para manejar este número gigantesco de configuraciones, el computador se tardaría ¡Más de 100 veces la edad del Universo en obtener los resultados!

Sin embargo, hay un factor fundamental que no hemos tomado en cuenta: el peso estadístico asociado a cada una de las configuraciones microscópicas del sistema para calcular el promedio. En otras palabras, si bien es cierto que en mecánica

Técnicamente, durante la simulación computacional, este recorrido entre las configuraciones microscópicas, generando principalmente las de mayor peso estadístico, debe satisfacer balance detallado, accesibilidad y no estar correlacionado para asegurar que la propiedad física calculada como un promedio sea confiable y cercano a su valor real.

Por lo tanto, gracias a este “arte”, en vez de utilizar las 2^{100} configuraciones del modelo de 100 átomos descrito anteriormente, basta con realizar una simulación Monte Carlo del sistema, generando apenas unas quinientas mil configuraciones (usamos el adverbio “apenas” porque la cifra 500.000 comparada con 2^{100} ¡Es extremadamente pequeña!), ya que en esas quinientas mil configuraciones fueron generadas con mayor frecuencia aquellas configuraciones

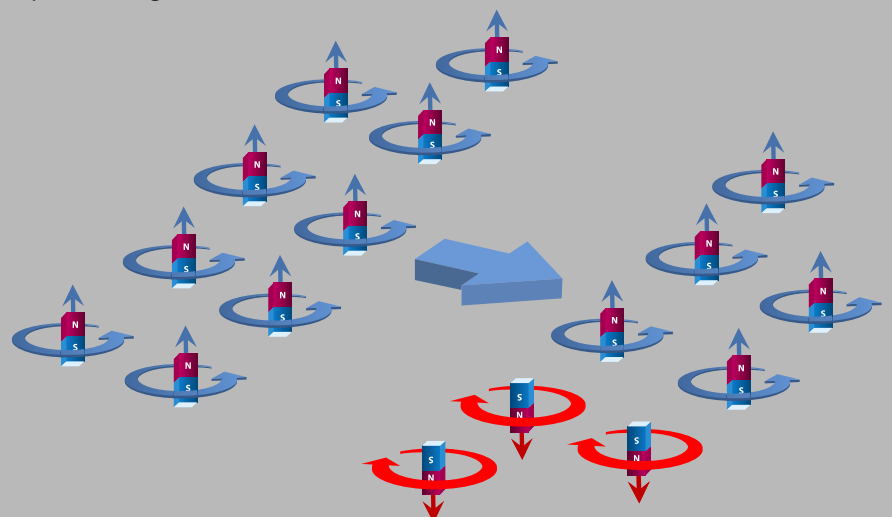


Figura 1

Esquema de dos posibles configuraciones microscópicas (izquierda y derecha) para la información magnética de un material magnético. En una simulación Monte Carlo la nueva configuración microscópica (de la derecha) es aceptada o rechazada comparando el peso estadístico de esa nueva configuración con un número aleatorio (similar a un “cara o sello” para una moneda lanzada al aire).

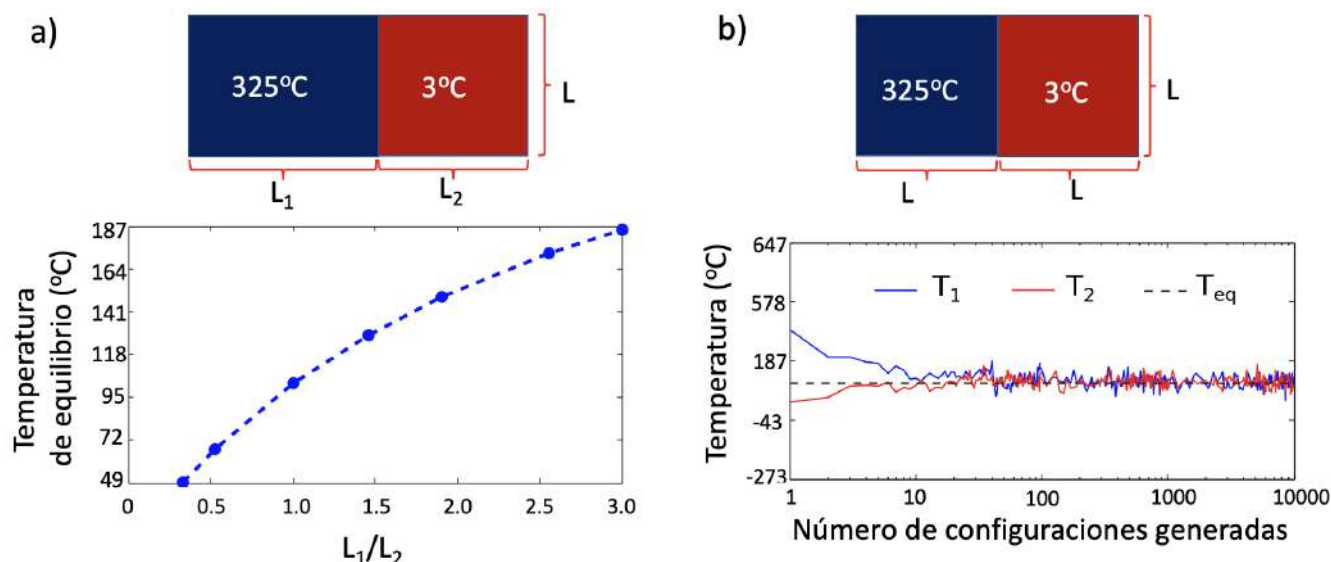


Figura 2

a) Temperatura de equilibrio de los dos sistemas magnéticos (azul y rojo) puestos en contacto (pegados) en función de la relación de sus longitudes L_1/L_2 cuando el sistema 1 (azul) está inicialmente a 325 °C y el sistema 2 (rojo) está inicialmente a 3°C. b) Temperatura de los dos sistemas desde que se ponen en contacto a medida que se van generando las configuraciones microscópicas durante una simulación Monte Carlo.

microscópicas de mayor peso estadístico (más importantes) compatibles con la propiedad física que se quiere calcular. Esta simulación Monte Carlo de 500.000 configuraciones microscópicas puede ser realizada en computadores y contabilizada para calcular propiedades físicas en pocos minutos de cálculo computacional.

En efecto, gracias a las simulaciones Monte Carlo se ha podido determinar y entender una serie de propiedades físicas principalmente en el área de la materia condensada, pero también aplicado en biología y medicina (para mayor detalle de estos resultados principales ver el libro de Landau y Binder [1]). Recientemente, en un trabajo hecho en colaboración con la Universidad de Santiago, hemos generado un método usando simulaciones Monte Carlo para generar configuraciones microscópicas de un sistema magnético con una energía fija (para detalles técnicos del método ver nuestro trabajo en el artículo Palma y Riveros [2]). En este trabajo usamos ese método para determinar la temperatura de equilibrio de 2 láminas magnéticas puestas en contacto (pegadas una al lado de la otra) promediando sobre las configuraciones microscópicas del ordenamiento magnético de las láminas en contacto. En particular, se muestra en la figura 2a, la temperatura de equilibrio de las 2 láminas cuando inicialmente (antes de ponerlas en contacto) la lámina 1 (azul) estaba a 325°C y la lámina 2 (roja) estaba a 3°C en función de la relación entre las longitudes de las 2 láminas magnéticas. Es interesante notar, por ejemplo, que cuando $L_1/L_2 = 1$ (láminas del mismo tamaño) la temperatura de equilibrio es diferente al intuitivo promedio entre las 2 temperaturas iniciales de las láminas: $(325 + 3)/2 = 164^\circ\text{C}$, lo que concuerda con que el calor específico de las 2 láminas no es constante respecto a la temperatura. Por otro lado, en la figura 2b se muestra como cambian las temperaturas T_1 y T_2 de las láminas azul y roja, respectivamente, a medida que se van generando las configuraciones microscópicas del ordenamiento de los momentos magnéticos de las 2 láminas en contacto (desde que se ponen en contacto). Se puede ver que luego de unas 100 configuraciones generadas por la simulación Monte Carlo, las temperaturas de ambas láminas magnéticas convergen a la temperatura de equilibrio (fluctuando en torno a ella).

Finalmente, también hemos utilizado “el arte” de las simulaciones Monte Carlo para determinar a través de las configuraciones microscópicas del ordenamiento magnético las propiedades de sistemas magnéticos a temperatura del “cero absoluto” (esto es a -273°C) y a temperatura muy cercana a ese valor (para mayores detalles técnicos el lector puede consultar nuestro trabajo en el artículo de Palma et al [3]); y también lo hemos utilizado en el trabajo Palma y Riveros [4] para calcular transiciones de fase cuánticas para láminas magnéticas a temperaturas muy bajas (cercanas al “cero absoluto”) cuando se le aplica un campo magnético (por ejemplo al acercarle un imán grande).

En conclusión, la mecánica estadística realiza la conexión formal para entender las características físicas que observamos (macroscópicas) de los cuerpos a través de la información microscópica del cuerpo (ordenamiento a escala molecular y atómica) que no podemos ver. Esto sumado con el avance computacional para el procesamiento de cálculos, las simulaciones Monte Carlo representan un “arte” para poder calcular en la práctica las propiedades físicas en base al promedio de la información de las configuraciones microscópicas. Las simulaciones Monte Carlo son especialmente interesantes y eficientes para determinar cómo cambian las propiedades del cuerpo en función de la temperatura, por ejemplo, la magnetización o energía en función de la temperatura y puede ser aplicado incluso en física cuántica, biología o medicina.

Referencias

- [1] D. P. Landau and K. Binder, “A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics”, Cambridge University Press, (2005).
- [2] G. Palma and A. Riveros, “General method to sample systems in the microcanonical ensemble using Monte Carlo simulations”, The European Physical Journal B 94, 23 (2021).
- [3] G. Palma, F. Niedermayer, Z. Racz, A. Riveros, and D. Zambrano, “Finite-size corrections to scaling of the magnetization distribution in the two-dimensional XY model at zero temperature”, Physical Review E 94, 022145 (2016).
- [4] G. Palma, and A. Riveros, “Meron-cluster simulation of the quantum antiferromagnetic Heisenberg model in a magnetic field in one- and two-dimensions”, Condensed Matter Physics 18, 23002 (2015).