

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**Motor de Otto
en el modelo
Clock de q -estados**

Michel Angelo Aguilera Pulgar

PARA OPTAR AL GRADO
MAGISTER EN CIENCIAS MENCIÓN FÍSICA

ENERO, 2022

Resumen

La presente investigación explora el desempeño de una máquina térmica y magnética considerando un modelo efectivo de spin interactuante denominado modelo Clock de q -estados (extensión del modelo de Ising), con redefinición de un hamiltoniano expresado con interacción de 'exchange' $\mathcal{J}$ y acople a campo magnético externo $\mathcal{B}$ (teoría ϕ^4 , escalar) en unidades de energía. Se expone la termodinámica para los 'relojes' $q = 2, 4, 6, 8$ de una red cuadrada $L = 3, 16, 32, 64, 128, 256$ bajo la teoría de campo medio, cual aproxima mediante la redefinición del spin efectivo en torno a un parámetro de orden m (relacionado a la magnetización M) y depreciando fluctuaciones de segundo orden torno a éste.

Se plantea visitar el ciclo clásico de Otto con reservorios definidos tal que los procesos en equilibrio térmico sucedan entre fases de orden y/o desorden identificadas en los diagramas de fase. Se revisan los desempeños del motor magnético en términos de trabajo neto aportado al ambiente y la eficiencia del mismo. Se comparan resultados obtenidos calculando la energía de todos los microestados ($q^{L \times L}$) respecto el resultado de la teoría de campo medio para una red 3×3 con bordes no interactuantes. Se propone una expresión para restringir la cantidad de vecinos cercanos efectivos z_{eff} en términos del tamaño de la red, a través de la minimización de la diferencia de energía interna exacta respecto campo medio. Se constata la transición de Berenzinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) para $q > 5$ en nuestros relojes $q = 6, 8$.

Con reservorios de temperatura baja y alta ($T_l = 0,6$ y $T_h = 6,0$) y campo magnético externo ($B_l = 1,0$ y $B_h = \{1,1, \dots, 4,0; 0,1\}$) en unidades de energía, notamos un mejor desempeño para el modelo $q = 4$. La eficiencia del ciclo es proporcional a la libertad del spin, es decir, con el tamaño de q . Al comparar el trabajo y eficiencia obtenido de forma exacta versus campo medio, notamos que la aproximación es menor. El trabajo neto por spin y la eficiencia, al ser comparado entre distintos tamaños de red, muestra como límite superior la menor cantidad del estudio $L = 3$.

Palabras Clave: Motor de Otto, Modelo Clock de q -estados, Transición BKT, Campo Medio.

Índice general

1. Introducción	1
2. El Modelo	5
2.1. Materiales	5
2.2. Sustancia de trabajo	6
2.3. Modelo clock q-estados	6
2.4. Hamiltoniano del sistema	7
2.5. Unidades	11
2.6. Nota sobre anisotropía	12
3. Promedios Térmicos	13
3.1. Termodinámica	13
3.2. Solución exacta	14
3.3. Campo medio	16
3.3.1. Spines vecinos efectivos	17
3.4. Relaciones termodinámicas	19
3.5. Desviación de promedios	20
3.5.1. Comparación $L = 3$ $q = 2$, Ising	21
3.5.2. Comparación $L = 3$ $q = 4$	22
4. Ciclo de Otto	23
4.1. El ciclo de Otto	23
4.2. Indicadores de desempeño	29
4.3. Metodología del estudio	31
5. Diagramas de Fase	32
5.1. Transiciones de fase	32
5.2. Temperaturas críticas	32
5.3. Reservorios del ciclo	38
6. Resultados	39
6.1. Planteamiento	39
6.2. q óptimo	40

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	III
6.3. Exacto versus aproximado	41
6.4. Rol del tamaño de la red	44
7. Conclusiones	46
7.1. Conclusiones	46
7.2. Más allá del estudio	47
8. Anexos	49
8.1. Sobre los anexos	49
8.2. Nota sobre Monte Carlo	50
8.3. Gráficos	52
8.4. Videos: Ciclos	63
9. Bibliografía	66

Capítulo 1

Introducción

La comprensión del fenómeno físico en materiales magnéticos data de más de 2.500 años con la observación del mineral Magnetita (Fe_3O_4). Con la invención del primer electro magneto se abre una puerta a la investigación teórica y experimental del magnetismo durante más de un siglo.

Los primeros experimentos mostraron que los materiales amplificaban o disminuían el flujo magnético suministrado definiendo materiales paramagnéticos y diamagnéticos respectivamente. Notaron una mayor amplificación en algunos materiales como el hierro (Fe), cobalto (Co) y níquel (Ni) cuales denominaron como ferromagnéticos. De alguna forma, cierto estado de algunos materiales tiene mayor tendencia a alinear los momentos magnéticos.

Fue alrededor de 1907 cuando Pierre Weiss [1] postula la existencia de un campo molecular en sus investigaciones del fenómeno ferromagnético, iniciando una propuesta sin origen para el alineamiento de los momentos magnéticos. Lenz (1920) y su pupilo Ising (1925) [2] propusieron una descripción teórica de la interacción a nivel de spin de un material ferromagnético para analizar la física cerca de la transición en torno a la temperatura de Curie; hoy conocido como el modelo de Ising.

Una descripción del modelo de Ising consiste en una red de partículas interactuantes donde el momento magnético puede orientarse hacia arriba o hacia abajo ($\sigma = \pm 1$ respecto eje z). Debido a que la interacción (J) decrece rápidamente con la distancia, podemos considerar el fenómeno como local sólo interactuando con las partículas. No es necesariamente intuible en este punto una transición de fase a cierta temperatura T_c , mientras si lo es que la magnetización disminuya de manera continua con la temperatura. A $T = 0$, los spines están alineados; con temperaturas mayores, tal que $KT \gg J$, la

interacción disminuye su rol y debido a la mayor entropía S una distribución de orientaciones desordenadas de spin es sugerida.

El modelo de Heisenberg (1928) considera el spin como un vector 3D interactuante con sus átomos vecinos. Desde la generalidad de Heisenberg podemos recuperar el modelo de Ising. Peierls (1936) constata que el modelo de Ising muestra propiedades ferromagnéticas. Kramers and Wannier (1941) registran resultados para redes en dos dimensiones.

La mecánica estadística nos ofrece variables termodinámicas si conocemos la distribución de energía de un sistema; si definimos el hamiltoniano, entonces podemos definir su función de partición. Onsager (1944) [3] obtiene la función de partición exacta para el modelo de Ising 2D sin un campo magnético externo; se constata una transición de fase. Se torna engorroso calcular para ciertos tamaños de red. Existen soluciones no analíticas desde la teoría de grupos de renormalización [9], K. Wilson (1971).

Lo propuesto por Weiss funda la aproximación de campo molecular o también conocida como aproximación de campo medio. La influencia de todos los vecinos sobre un spin se representa en un campo medio cual sigue la orientación promedio de los spines cercanos. Bragg y Williams (1934,1935) proponen su propia versión estudiando la transición de orden y desorden de sistemas binarios; el grado de orden juega un rol importante en el modelo de campo medio de Weiss. Bethe (1935) y Rushbrooks (1938) consideraron el campo medio acotado a la interacción de un spin central y sus vecinos cercanos igualmente.

Física exótica se ha propuesto mediante extensiones del modelo de Ising con próximo vecino cercano, extensiones como el q -state Potts models (1952) con filtro de vecinos. El modelo fue relacionado a 'planar Potts' o modelo Clock donde participa Cyril Domb. Para $q = 4$, el modelo 'planar Potts' se puede plantear como el modelo Ashkin–Teller, después Julius Ashkin and Edward Teller desarrollan un modelo equivalente en 1943. Este último sobre grillas periódicas nos muestra una primera transición de orden para $q > 4$ en 2D ($q > 2$ en 3D).

Por otro lado, el modelo Baxter (1972) propone acoplamientos multi-spin distinguiendo 2 sub-grillas acopladas por vecinos cercanos y por próximos vecinos cercanos; el modelo Baxter-Wu (1973) propone una grilla triangular con acoplamiento de 3-spin con vecinos cercanos.

El modelo de q -estados (q -state clock model) refiere a que el spin sólo puede orientarse en una de la q posibles direcciones sobre un reloj de q horas. En el marco de sólo considerar el término de interacción de intercambio, para $q > 4$ comienza a denominarse modelo XY con q -fold anisotropía, mostrando 2 transiciones Kosterlitz-Thouless [4]- [8] [26] [41] [60] (Challa and Landau 1986) [16]. Cuando $q \rightarrow \infty$ el modelo 'clock' tiende a un modelo de spin continuo; mostrando conectar a modelos XY de spin continuos. El campo de spin en cristales es una actual área de interés de la ciencia.

El estudio explora un modelo Clock de q -estados conteniendo en su hamiltoniano un término de interacción de 'exchange' y un campo externo. La energía interna del sistema puede considerarse representada en magnetización, por lo que, esta última y la temperatura podrían formar parte de una máquina térmica suficientemente pequeña para que el fenómeno sea dominado por el parámetro magnético exclusivamente. Se selecciona el ciclo de Otto [25] [27] [33] para el control de la transferencia de calor ambiente-sistema, con un enfoque clásico mediante procesos cuasi-estáticos, y se espera analizar el desempeño mediante la sensibilidad del trabajo y eficiencia respecto la discretización de las orientaciones del spin q y el tamaño de la red 2D L .

Las primeras cuestiones en la implementación de un modelo para la máquina térmica pueden ser preguntas tales ¿cómo obtener la función de partición de manera exacta? o ¿cuántas configuraciones posibles de orientación de espines tiene mi red?, por lo que la estrategia de obtención de promedios térmicos es fundamental en la investigación. Se plantea iniciar los cálculos del ciclo en una red de tamaño de control para calibrar un modelo aproximado denominado Campo Medio, bastante conocido en la ciencia.

Cuando la aproximación de campo medio exprese la función de partición definiremos la energía libre de Helmholtz, y finalmente la energía interna y la entropía. El análisis de la energía interna en término de la temperatura nos informará sobre los estados de orden magnético del sistema donde se espera que q tenga un rol respecto la cantidad de fases.

Publicaciones a la fecha [51] han constatado en diagramas de fases para modelos clock de q -estados que consideran interacción de 'exchange' y de campo magnético externo una bifurcación de temperaturas críticas apareciendo una fase de vórtices denominada BKT, por lo que la selección q orientaciones del spin nos recuerda considerar en los distintos caminos del ciclo térmico en estudio la fijación de 'fases de orden magnético'.

Una vez seleccionados los reservorios de nuestra máquina térmica, podremos explorar preguntas como: ¿cuál q tiene mejor desempeño en extracción de trabajo? o ¿cómo influye la resolución de la red?.

Capítulo 2

El Modelo

2.1. Materiales

Los estados de la materia y las transiciones de fase han impactado en la descripción de los fenómenos y tecnologías. Estudiar el orden y desorden de los parámetros magnéticos tiene aplicación directa en nuestro día a día. Los campos magnéticos producidos por los imanes del refrigerador o altavoces surgen de la alineación cooperativa de los espines de electrones en la materia, una correlación a largo alcance. El ferromagnetismo tiene aplicación en la industria siendo fundamental para aparatos eléctrico-mecánicos como electromagnetos, motores eléctricos, generadores, transformadores, test de materiales ferrosos y discos duros, entre otros. [30]

Durante el siglo pasado, el estudio de materiales ferromagnéticos nos brindó el modelo de Ising, y la extensión denominada modelo clock de q -estados enriquecerá la física de nuestro estudio. [10] [12] [13] [17] [18] [24]

Se presenta en este capítulo el modelo físico que modela un material de dos dimensiones. Definiremos una red de espines interactuantes, similar al modelo de Ising, con un aumento en las orientaciones posibles. Implementado el modelo clock de q -estados, definiremos el hamiltoniano del sistema.

2.2. Sustancia de trabajo

Consideremos una lámina cristalina de un material susceptible al fenómeno magnético. La escala de energía del estudio nos permite modelar el fenómeno como una red cuadrada de nodos equiespaciados con capacidad de interactuar entre ellos. Esta red está confinada en bordes que no interactúan con el sistema.

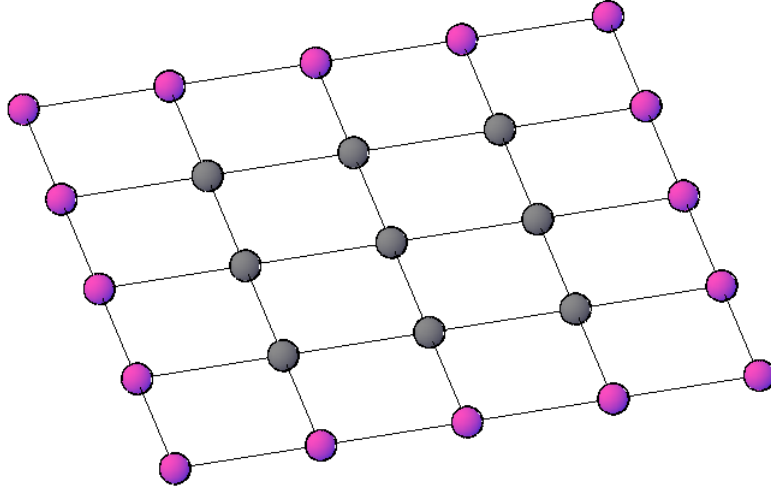


Figura 2.1: Isométrico de una red 3×3 . Se incluyen nodos de borde. Fuente: Propia.

Sobre cada nodo disponemos partículas con momento magnético representado con un vector 2D unitario. Se excluye el grado de libertad mecánico. La validez de los promedios térmicos depende del tamaño del sistema.

2.3. Modelo clock q-estados

Los modelos ferromagnéticos Clock (a veces conocidos como 'modelo vector Potts') [11] [19] [22] [26] [31] [35] [47] [56] [50] [52] corresponden a una versión discreta de XY model (O_2) y consiste en spines planales donde la orientación de éstos es restringida a q posibles ángulos respecto una referencia (Z_q). A bajas temperaturas se observa una fase de orden tipo Ising con rango largo de correlación. Para $q > 4$ se exhibe una fase intermedia entre ferromagnética y paramagnética denominada Berezinskii-Kosterlitz-Thouless

(*BKT*) [15] [34] que consiste en configuraciones magnéticas tipo vórtices y ondas de spin; el modelo fue a posteriori de que Kosterlitz y Thouless mostraran la existencia de un desarrollo crítico con singularidades y topología ordenada¹. A alta temperatura se observan fases desordenadas con decaimiento exponencial de correlación.

Se han estudiado las propiedades del modelo Clock para distintos q durante la historia. El modelo clock q -estados aparece como herramienta para resolver problemas de transiciones de fase; lo caracteriza respecto el modelo continuo el comportamiento crítico en el punto de transición debido a la pérdida de simetría continua.

En el modelo clock q -estados el spin apunta en una dirección de un set de posibilidades discretizadas en q partes equiespaciadas angularmente. Para $q = 12$ las opciones estarían dispuestas como horas de un reloj, Figura 2.3. En su forma mínima ($q = 2$) recupera el modelo de Ising. Expresemos el spin S con orientación j de q .

$$S_j = \left\{ \sin\left(2\pi\frac{j}{q}\right), \cos\left(2\pi\frac{j}{q}\right) \right\} \quad (2.1)$$

En la Figura 2.2, notamos distintos relojes a considerar en el estudio. Para cada configuración del spin se indica $\{j, S_j\}$.

Se ha constatado física del fenómeno magnético en investigaciones de este modelo mostrando una física exótica, que dado a la flexibilidad de acoplar con distintas orientaciones, invita a explorar la física de spin efectivo.

2.4. Hamiltoniano del sistema

El hamiltoniano se estima en un baño término en relación al modelo efectivo de momento magnético de partículas interactuantes. La representación del spin a nivel de microestados rige bajo libertad discreta con una familia finita de q orientaciones posibles (limitando $q \rightarrow \infty$ con grupo O_2), utilizando

¹David J. Thouless, John Michael Kosterlitz y F. Duncan M. Haldane fueron galardonados con el premio nobel de física del año 2016 por el descubrimiento y estudio de este tipo de transiciones y las fases topológicas asociadas.

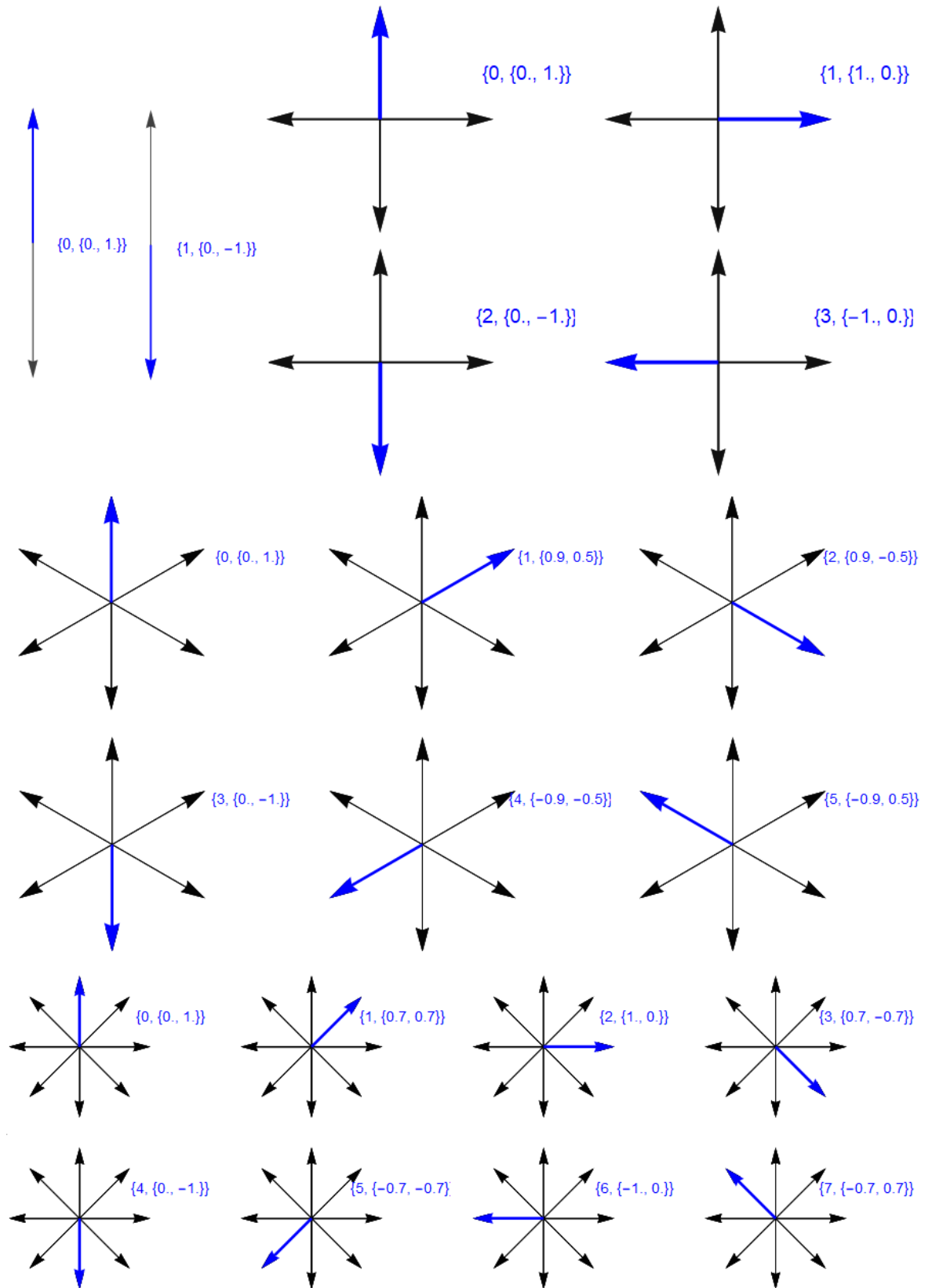


Figura 2.2: Relojes de q horas. En la parte de arriba de la figura $q = 2, 4$, al medio $q = 6$ y abajo $q = 8$.

una representación vectorial con teoría de acople a campo escalar.

A considerar una interacción de vértice electromagnético efectivo, cual se puede manifestar en el modelo con la integral de 'exchange' que el estudio considera escalar positiva, es decir, calibrable a materiales de la tabla periódica con comportamiento ferromagnético como el hierro *Fe*, cobalto *Co* o níquel *Ni*.

Contamos con acople a campo magnético, exhibiendo para el caso, sólo el término bipolar alineado al modelo Clock en orientación 1 de q ($\phi = 0$ respecto la vertical).

La sustancia en estudio se simplifica como partículas fijadas en una grilla de $L \times L = N$, número de nodos, caracterizando cada nodo por el momento magnético S con dirección restringida según el modelo q-clock.

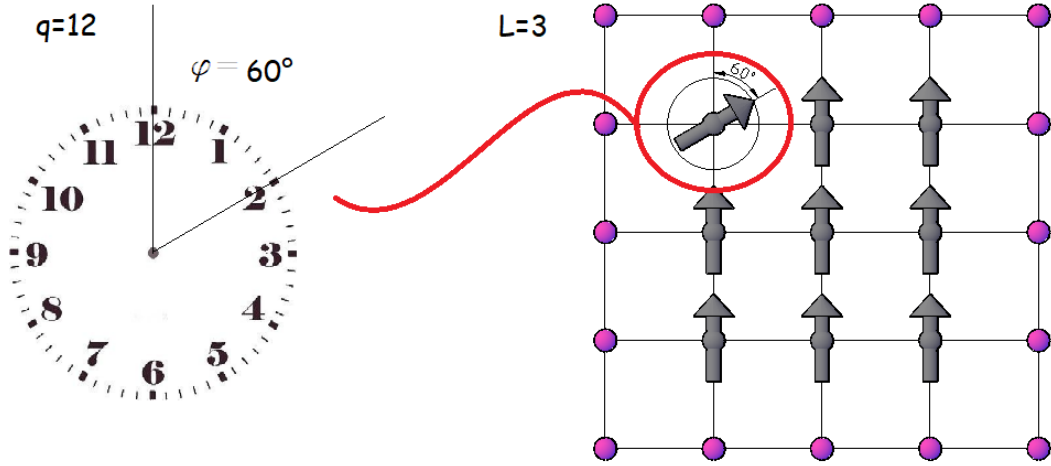


Figura 2.3: Ejemplo de dirección de spin. Fuente:Propia.

Las condiciones de borde del problema se proyectan con parámetro magnético nulo, el ambiente no interactúa con el sistema. Un concepto clave del método es definir los vecinos próximos (rol fundamental en la teoría de campo medio), por ejemplo imaginemos la red sobre una matriz de $L \times L$ donde el elemento de matriz $(1, 1)$, representando el 'primer' nodo de la red, se visualiza en la Figura 2.4.

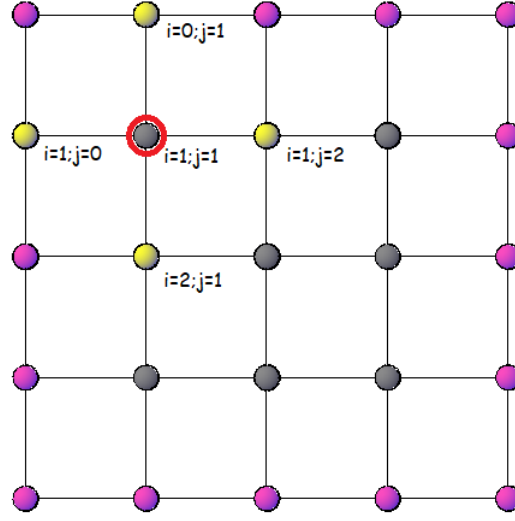


Figura 2.4: Vecinos próximos. Consideramos el nodo $(1,1)$ con vecinos interactuantes, a corto alcance, con disposiciones arriba, abajo, izquierda y derecha demarcados en color amarillo. Fuente:Propia.

Para un sistema cuántico con hamiltoniano $\mathcal{H}$ acoplado a un baño térmico con temperatura T y campo magnético externo $\mathcal{B}$ en la dirección z , se debe agregar la energía magnética debido a la libertad del spin efectivo ($\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} - \mathcal{B}M$), donde M es el operador que representa las componentes de la magnetización total en la dirección del campo magnético. Se plantea construir el hamiltoniano por términos.

El primer término del Hamiltoniano está relacionado a la interacción de 'exchange' con un factor de escala energética $\mathcal{J}$.

$$\mathcal{H}_{exchange} = - \sum_{\langle j,k \rangle} \mathcal{J} S_j \cdot S_k \quad (2.2)$$

Donde $\langle i, j \rangle$ corresponde a los nodos vecinos cercanos del nodo ' j '. El objeto que representa el spin se restringe al modelo Clock de q -estados, spin ' S_j '.

El segundo término corresponde a la interacción con el campo magnético externo $\mathcal{B}$.

$$\mathcal{H}_B = - \sum_j B(\widehat{n}_B \cdot S_j) \quad (2.3)$$

Finalmente, el hamiltoniano del sistema queda definido según la siguiente expresión ($\mathcal{J}$ y $\mathcal{B}$ contienen las unidades del fenómeno). Los vectores de orientación del campo magnético $\widehat{n}_B = (0, 1)$ (orientación $j = 0$ para todo q) y del spin S_j son unitarios adimensionales.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{exchange} + \mathcal{H}_B \quad (2.4)$$

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle j,k \rangle} \mathcal{J}(S_j \cdot S_k) - \sum_j \mathcal{B}(\widehat{n}_B \cdot S_j) \quad (2.5)$$

2.5. Unidades

Consideramos la temperatura y el campo magnético en unidades de energía, es decir, considerar la constante de Boltzmann y el magneton de Bohr iguales a la unidad. B es la energía de Zeemann y el operador de magnetización M es adimensional y da el componente del momento angular total en la dirección del campo en unidades de $\hbar$. Sin quitar generalidad, el estudio propone $\mathcal{J} = 1$ y $\mathcal{B} \in \mathbb{R}^+$. Los vectores de orientación del campo magnético $\widehat{n}_B = (0, 1)$ (orientación $j = 0$ para todo q) y del spin son unitarios adimensionales.

El magnetismo puede estabilizarse en estructuras cristalinas de metales como cierta resistencia a la conducción eléctrica. Encontramos en la tabla periódica elementos ordenados según su disposición magnética.

La integral de 'exchange' resulta positiva para Fe , Co y Ni en las curvas de Bethe-Slater, donde se potencia calibrar el modelo para algún material.

Respecto el orden de energía, estudios estiman la magnitud del acoplamiento de exchange para átomos de Fe [38] como $\mathcal{J}_{in_plane} = 5,2 meV$.

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn				
Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd				
Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg				

Figura 2.5: $\mathcal{J}$ depende del material. La tabla periódica muestra metales con conductividad en la zona azul y metales que exhiben magnetismo en la zona color rojo. Algunas estructuras cristalinas como *Fe*, *Co* y *Ni* se consideran, en su estado base, ferromagnéticos. Fuente: 'When magnetism can stabilize the crystal structure of metals' 2008 (Per Soderlind - Kevin T. Moore) [29]

2.6. Nota sobre anisotropía

Una exploración en un término de anisotropía en el hamiltoniano $\mathcal{H}_K$ podría presentar nueva física. El estudio da una mirada al fenómeno considerando anisotropía con acople al momento magnético. Se consideraba un parámetro $\mathcal{K} = 1$ con unidades de energía y orientado paralelo al campo ($\widehat{n}_K = (0, 1)$) o perpendicular al mismo ($\widehat{n}_K = (1, 0)$), pero los resultados no fueron concluyentes.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{Exchange} + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_K \quad (2.6)$$

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle j,k \rangle} \mathcal{J}(S_j \cdot S_k) - \sum_j \mathcal{B}(\widehat{n}_B \cdot S_j) - \sum_j \mathcal{K}(\widehat{n}_K \cdot S_j)^2 \quad (2.7)$$

Capítulo 3

Promedios Térmicos

'A theory is all the more impressive the simpler its premises, the greater the variety of phenomena it describes, and the broader its area of application. This is the reason for the profound impression made on me by classical thermodynamics. It is the only general physical theory of which I am convinced that, within its regime of applicability, it will never be overturned'

(Albert Einstein)

3.1. Termodinámica

Debemos revisar la fenomenología de las transiciones de fase y definir parámetros críticos. En el equilibrio térmico el desarrollo termodinámico de un sistema macroscópico se puede representar con su potencial. Con hamiltoniano $\mathcal{H}$ acoplado a un baño térmico con temperatura T , podríamos definir su función de partición, donde la traza se sitúa sobre un espacio de Fock conteniendo un número arbitrario de partículas.

$$Z(T) = e^{-\Omega(T)/T} = \text{Tr}[e^{-\mathcal{H}/T}] \quad (3.1)$$

Cuando los estados macroscópicos se representan en acoplamientos $\{g_j\}$, la función de partición en el límite termodinámico puede expresarse exponenciándolos. En nuestro modelo estos acoples definirían nuestra energía libre $F = F(g_1, g_2) = F(T, B)$. Analizar los límites termodinámicos en el espacio de acoplado (B, T) es analizar la no-analiticidad representando los bordes que separan fases del sistema.

La transición de fase magnética que podemos encontrar en algunos aisladores magnéticos de un estado paramagnético a un estado con orden fe-

romagnético, largo alcance en ausencia de un campo magnético externo, presenta una transición continua. El estado termodinámico puede referirse en términos de B y T .

En una fase ferromagnética, el parámetro de orden m corresponde a la magnetización espontánea que se define en términos de un valor esperado del operador magnetización. Al fenómeno describe ruptura espontánea de simetría debido que la magnetización permanece finita para $T < T_c$, incluso sin $\mathcal{B}$. Para $q = 2$ (Ising) el estado magnético rompe la simetría arriba-abajo (Z_2) del hamiltoniano.

$$m = - \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial B} F(B, T) = \lim_{B \rightarrow 0} \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle M \rangle}{N} \right) \quad (3.2)$$

Se presenta una ley del comportamiento del parámetro m finito en $T = 0$ hasta T_c , representada por $m(T) = \alpha_1(T_c - T)^{\alpha_2}$

3.2. Solución exacta

El estudio se basa en una extensión del modelo de Ising. El hamiltoniano original se expresa en la siguiente ecuación.

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle j, k \rangle} \mathcal{J} S_j S_k \quad (3.3)$$

Se propone explorar un modelo clock de q estados que incluya la interacción de intercambio y un término de interacción con campo externo. La discusión se centra en analizar el fenómeno ante distintas posibilidades de discretizar la orientación del spin ($q = 2, 4, 6, 8$).

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle j, k \rangle} \mathcal{J} S_j \cdot S_k - \sum_j \mathcal{B} S_j \quad (3.4)$$

Consideremos las l configuraciones posibles y su hamiltoniano asociado $\mathcal{H}_l$. La función partición se presenta en la siguiente expresión.

$$Z = \sum_l e^{-\beta \mathcal{H}_l} \quad (3.5)$$

La cantidad de microestados depende de la libertad de orientaciones de spin y la cantidad de nodos, en otras palabras, de q y L . Cada nodo tiene

q posibles estados y, al ser los nodos independientes, la cantidad de estados del sistema queda definido por la siguiente expresión.

$$N_{\text{estados}} = q^{L \times L} \quad (3.6)$$

L	q	N
3	2	512
3	4	262144
3	6	10077696
3	8	134217728
4	2	65536
4	4	4294967296
4	6	2.82111E+12
4	8	2.81475E+14

L	q	N
8	2	1.84467E+19
8	4	3.40282E+38
8	6	6.33403E+49
8	8	6.2771E+57
16	2	1.15792E+77
16	4	1.3408E+154
16	6	1.6096E+199
16	8	1.5525E+231

Tabla 3.1: Tabla con cantidad de microestados según q y L . Fuente:Propia.

En tabla 3.2, notamos que para $L = 3$ el modelo de Ising debe considerar 512 configuraciones de la red para estimar la función de partición. Para la misma red, si $q = 8$ se requieren 125 millones de configuraciones. Para redes con mayor resolución, por ejemplo $L = 16$, convendría llevar la cuenta en gúgols (10^{100}).

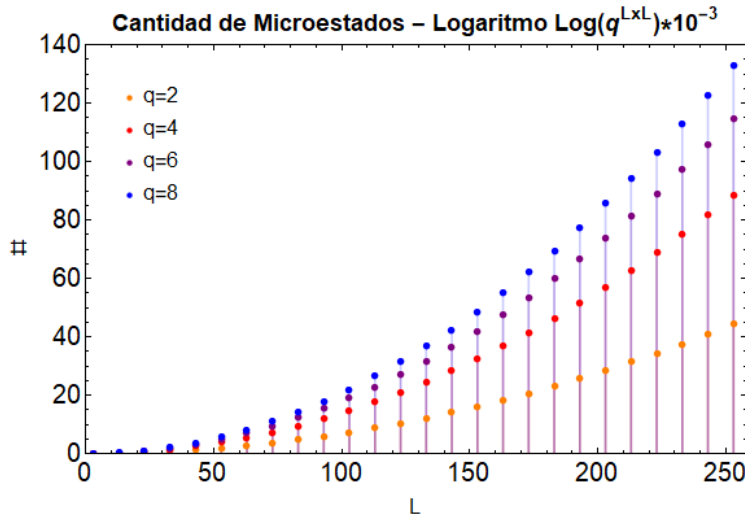


Figura 3.1: Cantidad de microestados (logaritmo sobre mil) para una red de hasta $L = 256$. Notamos un crecimiento cuadrático del logaritmo de las configuraciones. Fuente:Propia.

3.3. Campo medio

Dentro de la aproximación del campo medio, las fluctuaciones del parámetro de orden están completamente depreciadas y las interacciones entre diferentes grados de libertad se tienen en cuenta en promedios. La aproximación gaussiana es en cierto sentido la corrección de fluctuación principal a la aproximación de campo medio.

La teoría del campo medio se basa en el supuesto de que las fluctuaciones alrededor del valor promedio del parámetro de orden son tan pequeños que pueden despreciarse. Suponemos que el sistema tiene una magnetización finita

$$m = \langle S_j \rangle = \frac{\sum_{S_k} e^{-\mathcal{H}/T} S_j}{\sum_{S_k} e^{-\mathcal{H}/T}} \quad (3.7)$$

Podemos escribir $S_j = m + \delta S_j$, y despreciando términos cuadráticos de fluctuación

$$S_j S_k \approx -m^2 + m(S_j + S_k) \quad (3.8)$$

Reemplacemos el spin y consideremos los z vecinos con interacción a corto alcance, y que la invarianza traslacional termal permite considerar que el spin esperado sea independiente del nodo ($\sum_{\langle j,k \rangle} = z/2 \sum_k$).

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle j,k \rangle} S_j S_k - \sum_k \mathcal{B} S_k \quad (3.9)$$

$$\mathcal{H}_{CM} = \sum_j \underbrace{-z\mathcal{J}(mS_j - \frac{m^2}{2}) - \mathcal{B}S_j}_{\mathcal{H}_j} \quad (3.10)$$

La función de partición del nodo j queda definida por la libertad del spin q . Las orientaciones posibles de spin definen el conjunto de estados del nodo. Como los spines en el hamiltoniano de campo medio están desacoplados, la función de partición del sistema se representa como productoria de N (nodos de la red) términos iguales independientes.

$$\mathcal{Z}_1 = \sum_{j \in q} e^{-\beta \mathcal{H}_{CMj}} \rightarrow \mathcal{Z} = \mathcal{Z}_1^N \quad (3.11)$$

$$\mathcal{Z} = \left(\sum_{j \in q} e^{\beta (z\mathcal{J}(mS_j - \frac{m^2}{2}) - \mathcal{B}S_j)} \right)^N \quad (3.12)$$

Si consideramos un campo magnético efectivo con $B^* = B + z\mathcal{J}m$, el hamiltoniano de campo medio por nodos puede presentarse como

$$\mathcal{H}_{CMj} = z\mathcal{J}\frac{m^2}{2} - \mathcal{B}^*s_j \quad (3.13)$$

3.3.1. Spines vecinos efectivos

Intuitivamente la cantidad de vecinos cercanos para campo medio es 4 al considerar los nodos arriba, abajo, izquierda y derecha. La energía interna vía campo medio, calculada con esta premisa, difiere de la exacta. Al probar distintos valores se encuentra, para $L = 3$, que el valor z que minimiza la diferencia de energía interna es 2.67 aproximadamente. Al interpretar el valor, se prueba con una ponderación de vecinos interactuantes por nodo donde los bordes (no interactuantes) poseen un rol fundamental.

Se propone una expresión para la estimación de cantidad de vecinos cercanos a ocupar en la teoría de campo medio cuando la red tiene una resolución genérica $L \times L$.

$$z_{eff} = \langle z_j \rangle = \frac{\sum z_j n_j}{L^2} \quad (3.14)$$

Para la red cuadrada con vecinos cercanos arriba, abajo, izquierda y derecha, la expresión queda determinada por la siguiente expresión.

$$z_{eff} = \frac{4 \times (L - 2)^2 + 3 \times 4(L - 2) + 2 \times 4}{L^2} \quad (3.15)$$

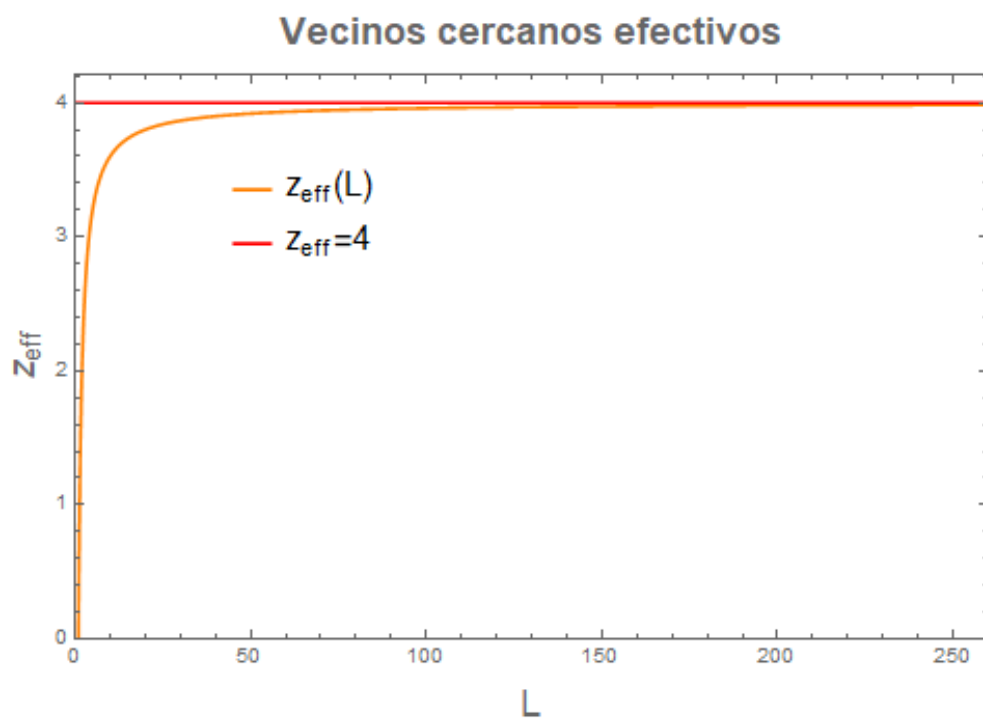


Figura 3.2: Cantidad de vecinos cercanos en función del tamaño de la red.
Fuente:Propia.

3.4. Relaciones termodinámicas

La solución analítica de nuestro problema es posible debido a la relación entre la función de partición con las variables macroscópicas. La energía libre de Helmholtz (F) y la energía interna (U) quedan definidas por las siguientes expresiones. [19]

$$F = -T \ln Z \quad (3.16)$$

$$U = T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \quad (3.17)$$

Notar que la primera ley nos muestra

$$\Delta U = Q + W = \Delta TS + \Delta F \quad (3.18)$$

Si la energía interna del manifiesta como magnetización,

$$dF = -SdT - MdB \quad (3.19)$$

El cambio de la energía libre en la temperatura nos definirá la entropía del sistema y la magnetización.

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}; \quad M = -\frac{\partial F}{\partial B} \quad (3.20)$$

La capacidad calorífica, B fijo, se puede expresar como el cambio de la energía interna respecto la temperatura.

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (3.21)$$

3.5. Desviación de promedios

Nuestro ciclo de Otto habita en un espacio termodinámico representado en superficies de parámetros macroscópicos, cuales pueden obtenerse por distintos caminos.

Los promedios termales de nuestro modelo q Clock son calculadas mediante las relaciones micro-macroscópicas. Al contar con todas las configuraciones posibles podemos expresar la función de partición. La primera ley termodinámica y relaciones de Maxwell sugieren energía libre del sistema (energía interna menos energía no apta para realizar trabajo) en términos de temperatura y campo magnético externo. La función de partición contiene toda la información microscópica del sistema (caso exacto, 'parcialmente' caso campo medio) y conocemos su relación con la energía libre.

La entropía del modelo puede definirse desde la energía libre, de igual forma la magnetización. La energía interna puede ser expresada directamente desde la función de partición, entonces desde la energía libre.

Para la obtención de macroestados de forma exacta o con hamiltoniano sin fluctuaciones de segundo orden (teoría campo medio), disponemos del procedimiento indicado en párrafos anteriores.

Por otro lado, la aproximación de Monte Carlo con selección de Metrópolis nos entrega promedio de variables macroscópicas, perdiendo de vista la función de partición. Se excluye la entropía de lo obtenido por esta vía y la definición indirecta de ésta suele mostrar problemas (al no contar con toda la información del modelo), ya que el algoritmo dispuesto no logra 'salir' de uno de los q puntos de equilibrio en regiones con temperaturas y campos bajos que converge vía caminos estocásticos.

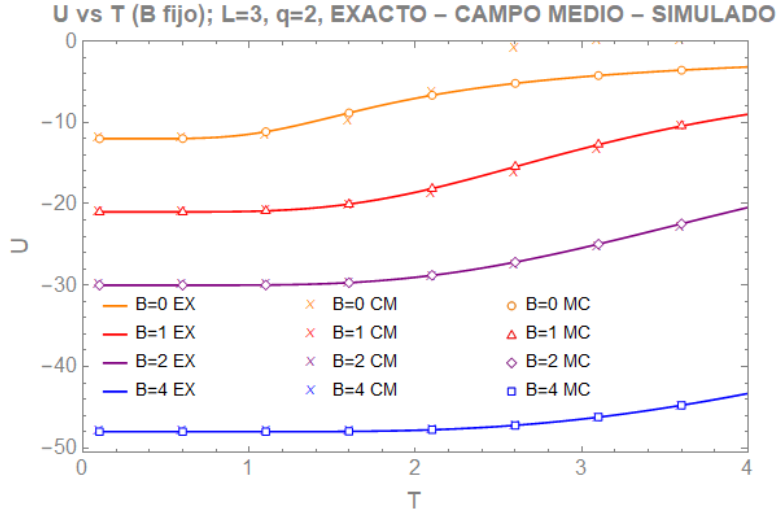
Aunque la presente investigación selecciona campo medio como herramienta para explorar la física del fenómeno cuando el tamaño de la red genera demasiados microestados para expresar la función de partición de forma exacta, este capítulo incluye Monte Carlo para presentar la aproximación respecto al caso exacto de este método (ver Anexo 1).

Se propone visualizar la energía interna y la entropía obtenidas de manera exacta, aproximada mediante campo medio o simulación de Monte Carlo para una red de $L = 3$ (3×3). Se analizan comportamientos para $q = 2, 4$.

3.5.1. Comparación $L = 3$ $q = 2$, Ising

El modelo de Ising para la red indicada presenta los siguientes resultados para la curva de energía interna (U) y entropía (S) en términos de temperatura en el rango 0 a 4 ua, para campo fijo $B = 0, 1, 2, 4$.

(a) Energía interna U $q = 2$ (EX,CM,MC).



(b) Entropía (S) $q = 2$ calculada para el caso exacto (EX), campo medio (CM) y simulado vía Monte Carlo (MC).

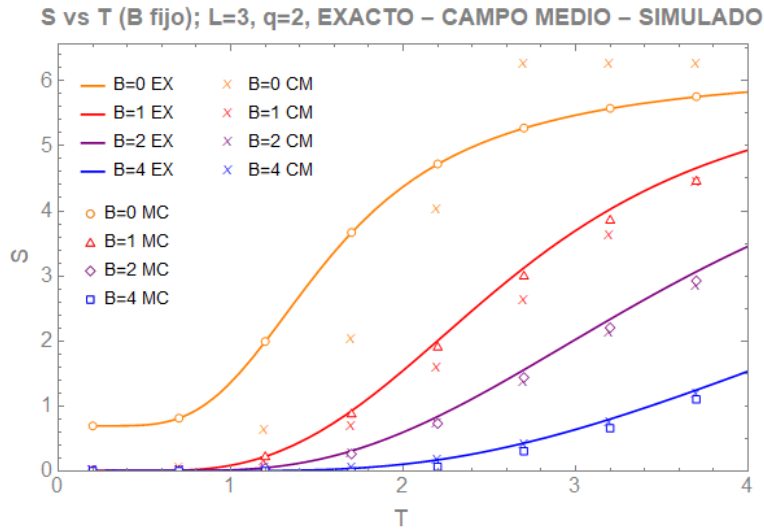
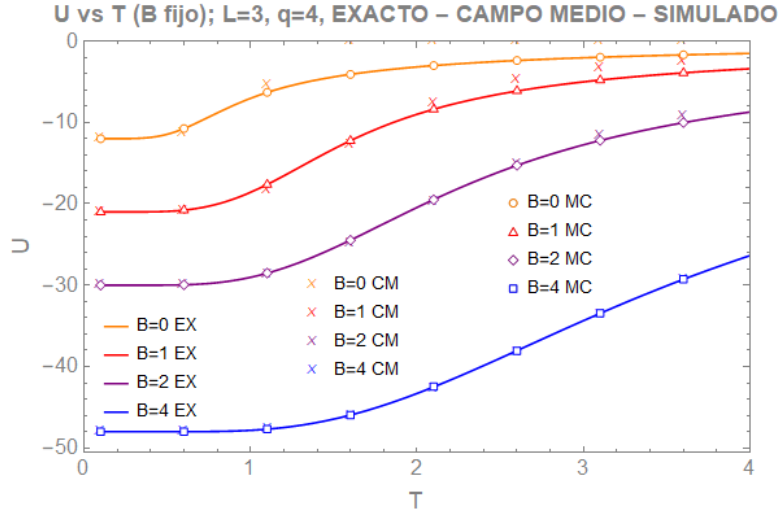


Figura 3.3: Energía interna y entropía $L = 3$, $q = 2$ (Ising); obtención exacta, aproximación teoría campo medio y simulación de Monte Carlo (Metropolis). Fuente:Propia.

3.5.2. Comparación $L = 3$ $q = 4$

El modelo de $q = 4$ para la red indicada presenta los siguientes resultados para la curva de Energía interna y Entropía en términos de temperatura en el rango 0 a 4 ua, para campo fijo $B = 0, 1, 2, 4$.

(a) Energía interna (U) $q = 4$ (EX,CM,MC).



(b) Entropía (S) $q = 4$ calculada para el caso exacto (EX), campo medio (CM) y simulado vía Monte Carlo (MC).

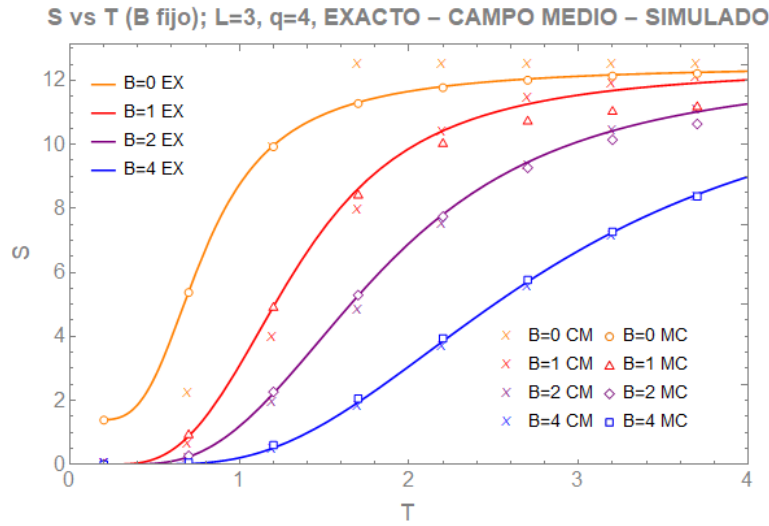


Figura 3.4: Energía interna y entropía $L = 3$, $q = 4$; obtención exacta, aproximación teoría campo medio y simulación de Monte Carlo (Metropolis). Fuente Propia.

Capítulo 4

Ciclo de Otto

4.1. El ciclo de Otto

Si tomamos un enfoque clásico, proponemos una máquina térmica con parámetro mecánico, planteamos las limitaciones del modelo con la entropía S , y considerando los acoplos del hamiltoniano en términos de temperatura T y volumen V , podemos 'operar' un ciclo de Otto.

Al conectar tuplas (T, V, S) con dos caminos isentrópicos y dos caminos isocóricos contamos con un ciclo de Otto, que de alguna forma, está presente en varios motores de combustión interna con encendido vía 'chispa' eléctrica de uso diario. Nicolaus Otto en 1876, propone una aproximación teórica donde describe transferencia de calor a volumen constante. A inicios del siglo XXI, las versiones actuales del motor de Otto discuten calidad y desempeño en términos de la potencia y la eficiencia de la misma.

Se propone estudiar una versión magnética de este ciclo a través de una colección de spin modelados de forma efectiva mediante el modelo Clock, situada a una escala de energía tal que el hamiltoniano puede considerarse acoplado a un parámetro magnético. El fenómeno propuesto nos permite excluir el parámetro mecánico, y la energía libre ser expresada en términos de la temperatura T y campo B (magnético externo). [53] [54] [57] [59]

Desde alguna mirada, el ciclo de Otto queda definido por 4 tuplas del espacio de parámetros que están restringidas con reservorios bajos y altos. Si visualizamos nuestro ciclo clásico en la entropía del sistema temperatura dependiente (para cierto campo arbitrario, pero fijo) podemos considerar una cierta variación del sistema por procesos cuasi-estáticos proponiendo caminos

a entropía constante (B libre) y a campo constantes (S libre) 'ortogonales' entre ellos. La temperatura se puede visualizar como una isoterma cual fuesen curvas de nivel de temperatura.

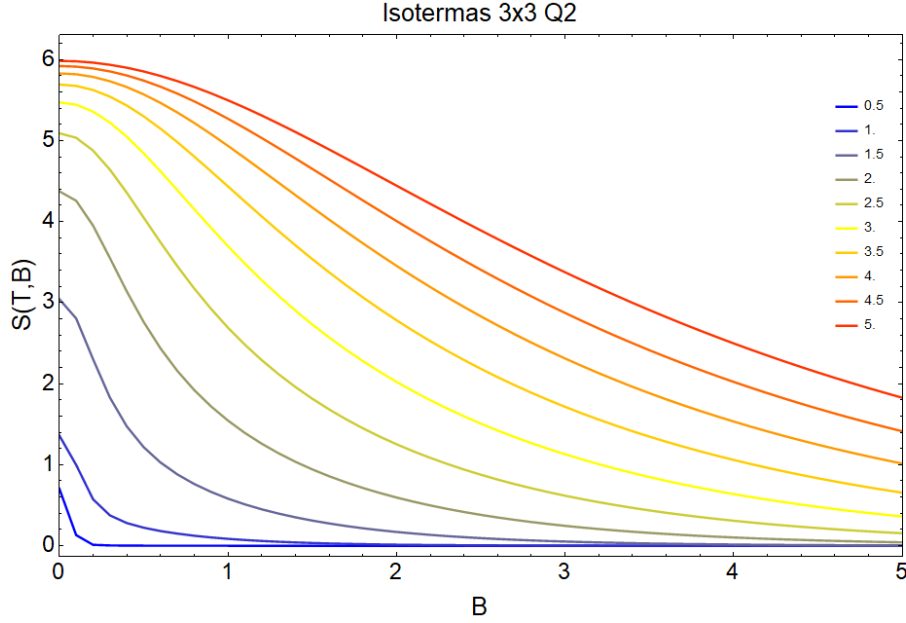


Figura 4.1: Entropía versus campo magnético externo de una red 3×3 , modelo de Ising ($q = 2$). Cada línea del gráfico representa una isoterma con temperatura menor (color azul) a mayor (color rojo). Lo anterior nos ayuda a visualizar los reservorios térmicos, cuales podríamos ubicar el 'frio' de ellos en la zona de líneas azules y el 'caliente' en la zona de líneas rojas. Fuente:Propia

Los reservorios térmicos definen un punto de temperatura bajo T_l y un punto de temperatura alto T_h para el ciclo. Se propone seleccionar un campo bajo B_l y campo alto B_h de forma similar, pero se invita al lector a imaginar cual fuese una perilla que sintoniza una radio de los '90 cuando hablemos del 'control' que tenemos al seleccionar B .

Imaginemos definir un punto A con coordenadas $(B_l, T_l, S(B_l, T_l))$ y un punto C con coordenadas $(B_h, T_h, S(B_h, T_h))$. Para el caso, sin perder generalidad y a modo de ejemplo, imponemos $T_l = 1$ y $B_l = 1$ cuales determinan una entropía $S(B_l, T_l) = 0,09$; por otro lado, imponemos $T_h = 5$ y $B_h = 3$ cuales determinan una entropía $S(B_h, T_h) = 3,38$. Debiésemos ubicar estos puntos en la figura de isoterma antes mostrada con $(B_l, S(B_l, T_l))$ sobre la

isoterma T_l y $(B_h, S(B_h, T_h))$ sobre la isoterma T_h .

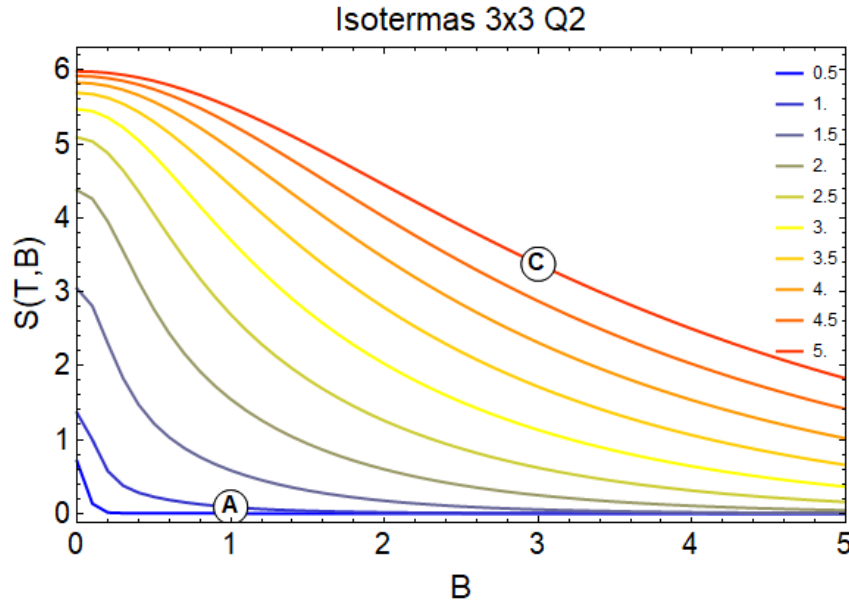


Figura 4.2: Puntos A y C que definen el ciclo de Otto. Fuente:Propia

El punto B está restringido a moverse por una línea isentrópica hasta B_h . Encontrar la isoterma adecuada T_B satisface la siguiente expresión.

$$S(B_l, T_l) = S(B_h, T_B) \quad (4.1)$$

La efectividad del modelo tiene relación a una serie de transiciones con ΔT menor al tiempo de relajación en cada punto de equilibrio hasta llegar al punto B. El proceso sugiere inyectar trabajo desde el ambiente, trabajo magnético, y el proceso se puede esquematizar según la siguiente figura.

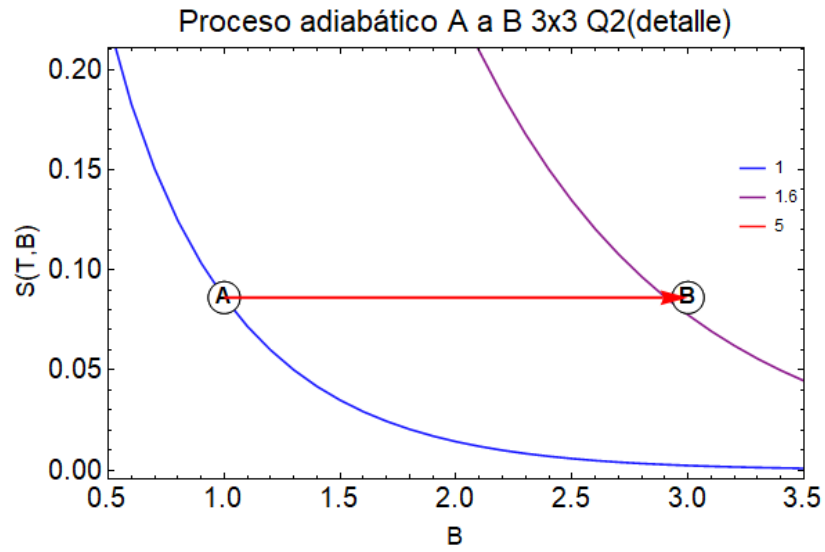


Figura 4.3: Proceso adiabático A y B. Fuente:Propia

Se propone 'calentar' el sistema hasta el reservorio alto fijando el campo.

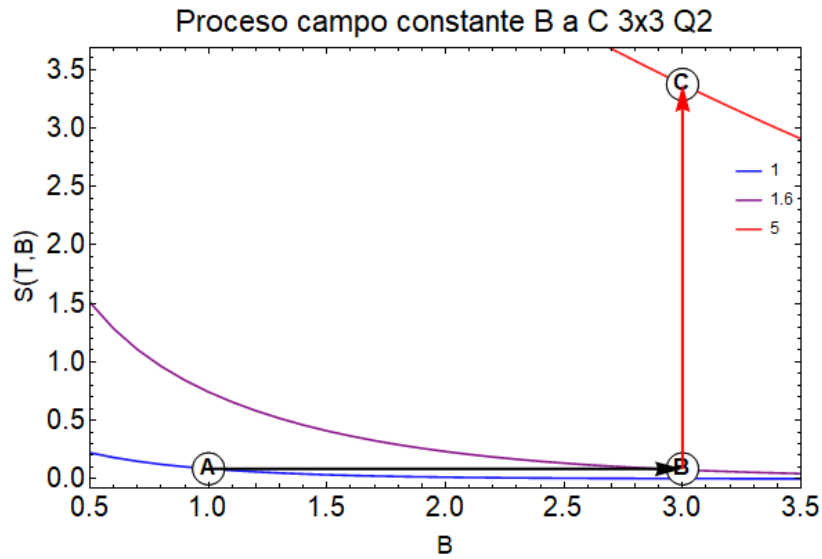


Figura 4.4: Proceso campo constante B y C. Fuente:Propia

Debemos pensar que el sistema puede liberar energía manifestada como trabajo hacia el ambiente. En el proceso, se requiere encontrar una isoterma T_D donde ubicar un punto D que tenga igual entropía que el punto C e igual campo que el punto A.

$$S(B_h, T_h) = S(B_l, T_D) \quad (4.2)$$

Se define el punto D, quien representa un punto clave para cerrar el ciclo.

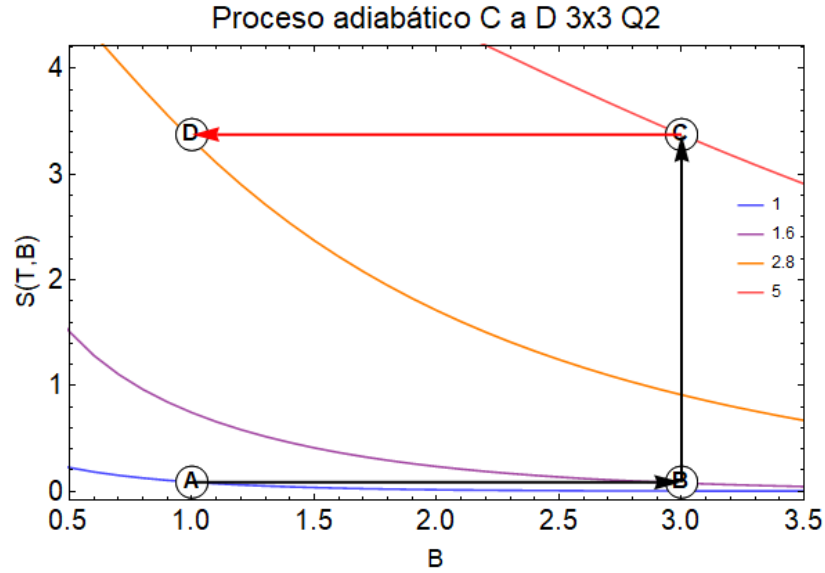
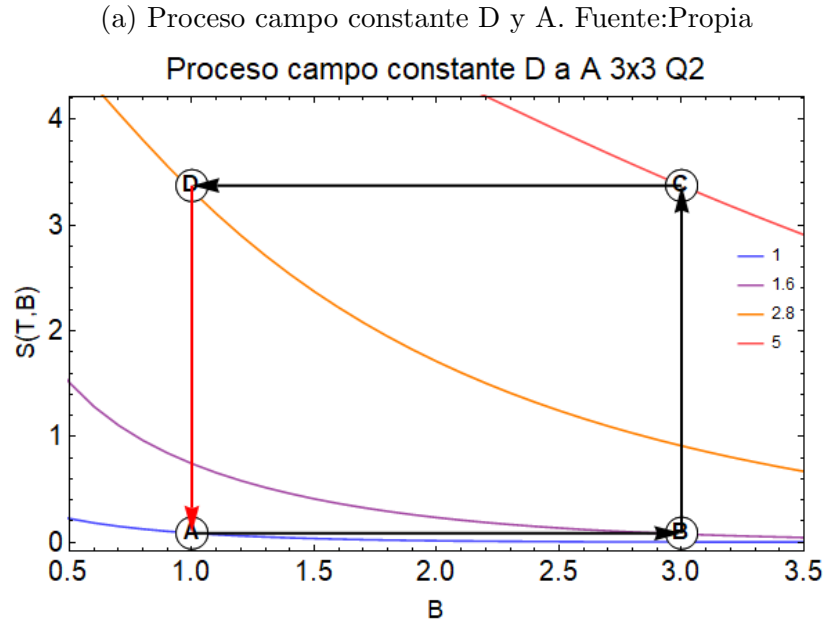


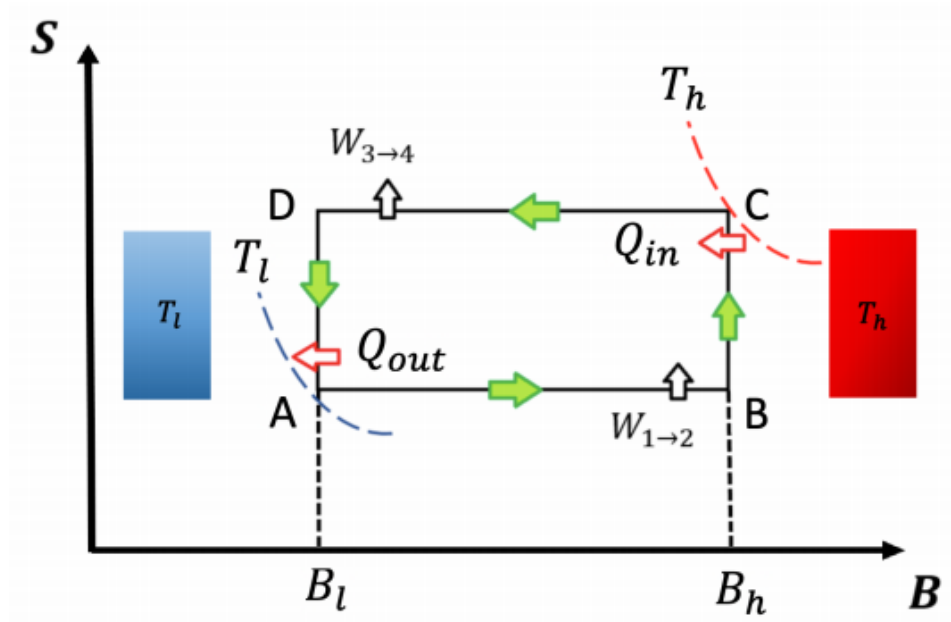
Figura 4.5: Proceso adiabático C y D. Fuente:Propia

Finalmente, nuestro ciclo magnético de Otto se cierra volviendo al punto A donde hay transferencia de calor del sistema al ambiente por un camino a campo constante, ver figura 4.6a.

Desde la mirada de la modelación es conveniente trabajar en la búsqueda de puntos del ciclo con procesos 'rectangulares' donde los reservorios proponen líneas isovalóricas horizontales y verticales, la entropía (adiabático) y el campo. cada proceso logra infinitesimalmente equilibrio térmico, ver figura 4.6b.

Figura 4.6: Diagramas de fase de una red 3×3 para los relojes del estudio.

(b) Entropía versus campo magnético externo. Ciclo clásico de Otto; una representación genérica del ciclo esquematizando la secuencia $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow A$. Fuente: [58]



4.2. Indicadores de desempeño

El trabajo y la eficiencia pareciesen indicadores propios de desempeño de un proceso termodinámico, por lo que, se proponen ocupan como escalares comparables entre distintos modelos Clock de q estados para una misma red. Pero, ¿cómo calcular el trabajo y eficiencia de un ciclo magnético de Otto?. [58]

Conociendo el calor que entra y el que sale respecto al sistema (que no es otra cosa que manifestaciones de energía) podemos pensar que equivale al trabajo neto del ciclo, pues representan consistencia con la primera ley de la termodinámica. En el escenario clásico, el calor inyectado Q_{in} y el emitido Q_{out} (a campo magnético externo constante) corresponden a la diferencia de la energía interna que varía de alguna forma por el desorden al inyectar energía al sistema o la tendencia al orden al extraerla respectivamente; la entropía tiene un rol fundamental y por la segunda ley entendemos que aumenta. La reversibilidad del ciclo tiene relación a que el trabajo que ejerce el ambiente sobre el sistema, en el proceso A a B, varía a estados de mayor energía, manifestada microscópicamente como variación de magnetización. De igual forma, para el proceso B a C, el ambiente inyecta energía como calor llevando el sistema a estados de mayor energía manifestadas en el aumento de factores acoplados a temperatura.

El calor queda definido por la integral de energía entre los puntos de inicio y fin del tramo de ciclo a campo externo constante.

$$Q_{in} = U_C(T_h, B_h) - U_B(T_B, B_h) \quad (4.3)$$

$$Q_{out} = U_A(T_l, B_l) - U_D(T_D, B_l) \quad (4.4)$$

Donde la energía interna (etiquetada por el punto que representa) está definida para temperatura y campo del vértice del ciclo. Es requerido definir las isothermas T_B y T_D .

La interpretación de un camino adiabático para un proceso en estado distinto al equilibrio cuasi-estático requiere condición de conservación de probabilidad de ocupación entre los estados de inicio y término de un proceso con entropía constante. El punto final del proceso, no necesariamente, llega al punto máximo de energía y la libertad de no estar en la cota se expresa

como la integral de energía.

Con procesos con tiempos menores al de relajación, las expresiones de calor de entrada y salida quedan definidas por las siguientes expresiones.

$$Q_{in} = \sum_j E_j(B_h)[P_j^C(T_h, B_h) - P_j^B] \quad (4.5)$$

$$Q_{out} = \sum_j E_j(B_l)[P_j^A(T_l, B_l) - P_j^D] \quad (4.6)$$

Donde el calor queda expresado en términos de estados de energía y probabilidad de ocupación a cierta temperatura.

El trabajo neto del sistema al ambiente queda definido por la diferencia de calor que entra al sistema:

$$\mathcal{W} = Q_{in} + Q_{out} \quad (4.7)$$

Para límite clásico,

$$\mathcal{W} = U_A + U_C - (U_B + U_D) \quad (4.8)$$

Para puntos fuera del equilibrio,

$$\mathcal{W} = U_A + U_C - \sum_j (E_j(B_h)P_j^B + E_j(B_l)P_j^D) \quad (4.9)$$

La eficiencia queda definida por:

$$\eta = \frac{\mathcal{W}}{Q_{in}} \quad (4.10)$$

4.3. Metodología del estudio

Para tamaño de red y q fijo podemos encontrar una expresión para entropía y energía interna en términos de la temperatura y el campo externo. Al definir un reservorio (T_l, T_h, B_l, B_h) se ubican los vértices principales del ciclo y de deben identificar las isothermas T_B y T_D de los puntos faltantes. Con los cuatro puntos del ciclo (fijados por el reservorio), podemos calcular su desempeño mediante trabajo neto y eficiencia. En principio cambiando q , bajo igual reservorio, podemos comparar desempeños.

Los reservorios tiene un rol fundamental en la definición del ciclo, y considerando que 'el usuario de esta máquina térmica' podría interactuar con el sistema, vía manipulación del campo externo, se propone calcular la curva de trabajo a obtener de una colección de ciclos termodinámicos ante la libertad de selección del campo alto B_h .

Pero, ¿qué criterio ocupar para seleccionar reservorios?. El modelo de Ising se origina en la necesidad de describir el fenómeno ferromagnético antes de su transición a fase desordenada, con límite en temperatura de Curie, y la motivación del estudio nos indica que nuestros relojes pueden habitar en fases magnéticas distintas. Una transición de fase nos indica máximos de capacidad calorífica, es decir, el cambio de energía interna del sistema ante un cambio de temperatura se muestra más sensible. Se propone explorar que sucede al escoger un reservorio frío que nos ubique en una fase ordenada y el punto caliente en un estado desordenado.

Para fijar reservorios bajos y altos máximos observaremos las transiciones de fases de orden para los distintos modelos Clock. Los procesos a campo constate transitarán entre fases ordenadas y desordenadas.

Capítulo 5

Diagramas de Fase

5.1. Transiciones de fase

La publicación 'Entropy and Mutability for the q -state Clock Model in Small System' (2018) [51] presenta la termodinámica de un modelo clock de q -estados ($q = 2, \dots, 20$) y el tamaño de la red $L = 3, \dots, 64$ con bordes libres. Se encuentra la transición Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) para $q > 5$ independiente del tamaño de la red.

Para $q < 5$, la fase ferromagnética transiciona a paramagnética; en cambio, para $q \geq 5$ la transición es a un estado 'parcialmente' ordenado donde se caracteriza por la generación de 'vórtices', entre transiciones BKT.

En el capítulo anterior, se presentó el ciclo de Otto y la importancia de la definición de reservorios en los puntos A (B_l, T_l) y C y (B_h, T_h). Se plantea definir un rango de operación del ciclo visualizando las transiciones de fases magnéticas para $q = 2, 4, 6, 8$; en el marco de una red de 3×3 .

5.2. Temperaturas críticas

Describir la energía interna del sistema en términos de la temperatura recae en el análisis de la capacidad calorífica de la sustancia de trabajo. Los máximos valores de la capacidad calorífica definen fases de orden magnético, por lo que, se propone un análisis cualitativo del comportamiento del calor específico respecto a temperatura y campo magnético externo, para $q = 2$ y $q = 4$, ver figura 5.2. De la misma forma, se plantea una visión de los máximos de capacidad calorífica para $q = 6$ y $q = 8$, ver figura 6.4.

La obtención de la curva que representa el límite entre fases se basa en maximizar la capacidad calorífica para un campo dado y guardar el par de puntos (B_{fix}, T_{cr}) para cada modelo. En la figura 5.3 visualizamos el diagrama de fase para $q = 2$ y $q = 4$ por un lado (se propone visualizar la aproximación de la teoría de campo medio respecto el cálculo exacto), mostrando sus fases ferromagnéticas (FM) y paramagnéticas (PM). En la parte figura 5.4, visualizamos las transiciones BKT para $q = 6$ (se constatan regiones con transición FM-PM similar a $q = 2, 4$ y con transiciones tipo (BKT) y $q = 8$).

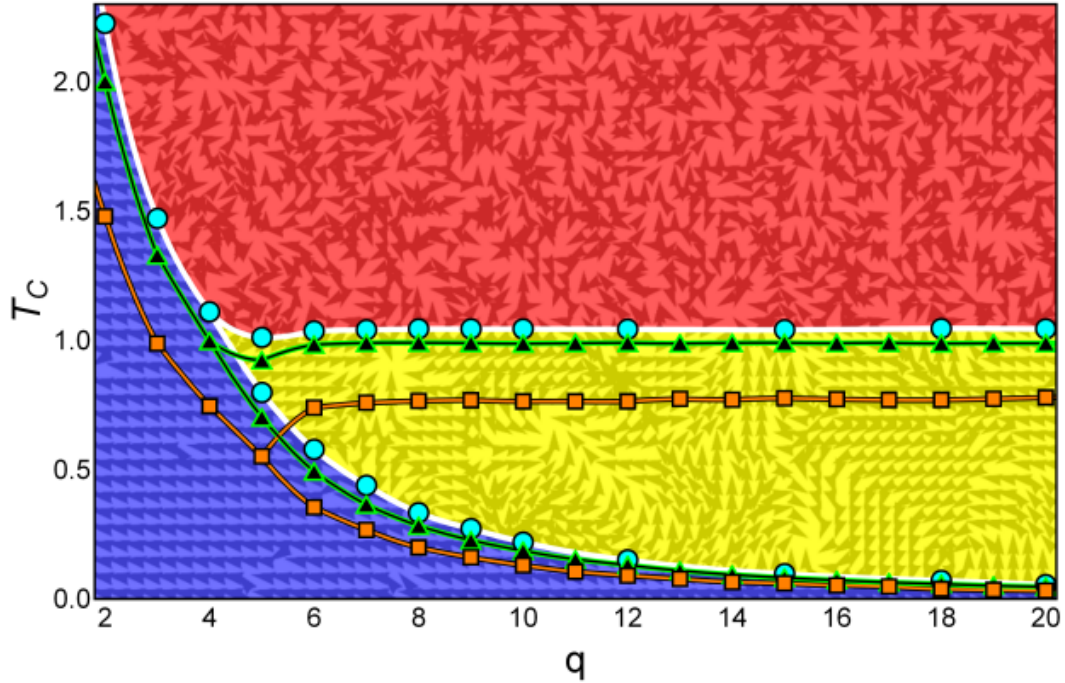


Figura 5.1: Diagrama de fase para el modelo clock de q -estados con red cuadrada de 3×3 en cuadrados color naranja, 10×10 en triángulos color negro y 64×64 en círculos color calipso. Fuente: [51]

Figura 5.2: Calor específico C en términos de temperatura T y campo magnético externo B para $q = 2$ y $q = 4$. En las figuras, notamos que el máximo del calor específico se ubica en un rango de menor temperatura para $q = 4$, dando información de que la región de desorden sea de mayor tamaño ante un rango de temperatura determinado del ciclo. Fuente:Propia

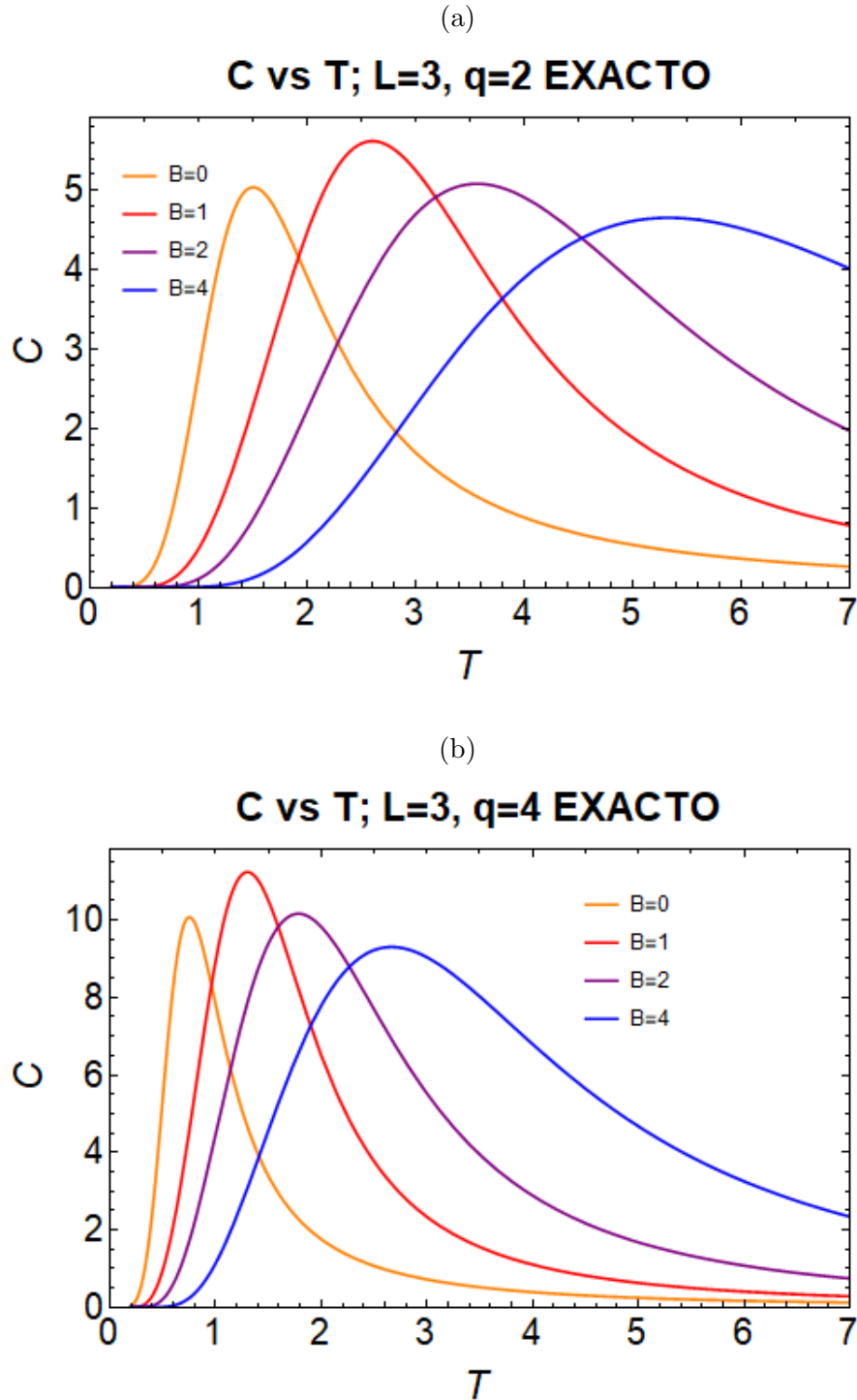
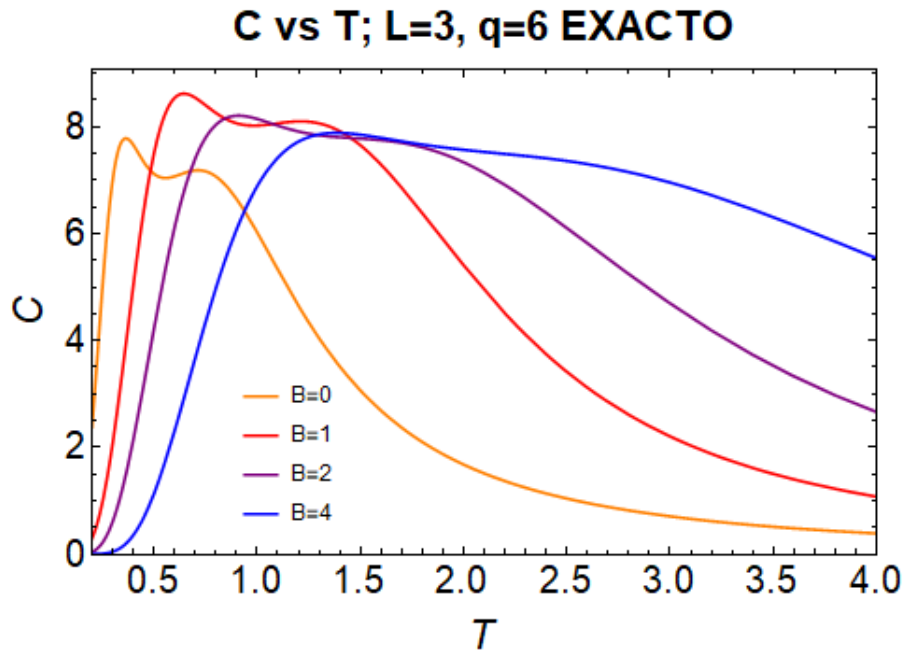


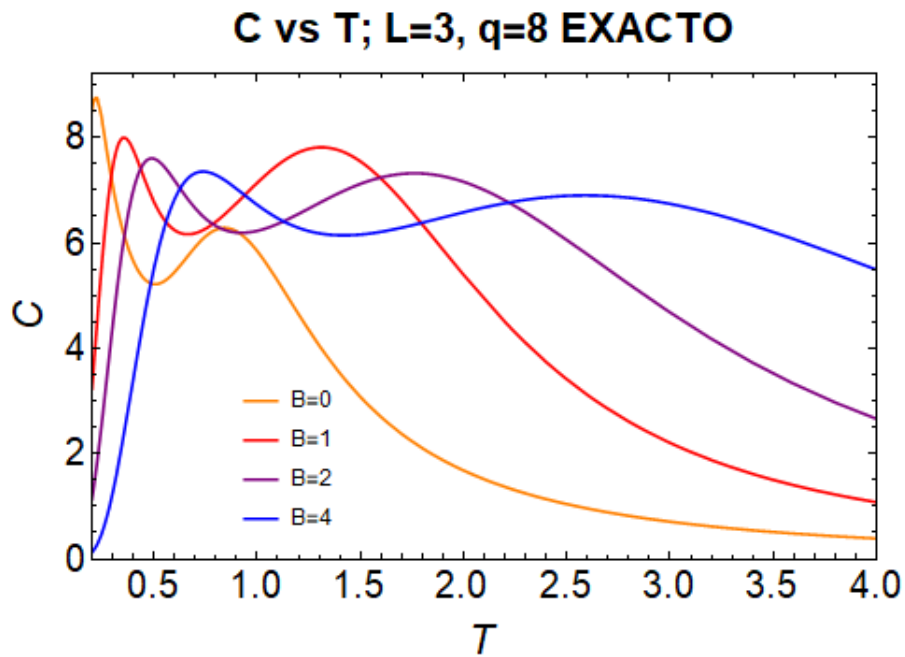
Figura 5.3

Figura 5.4: Calor específico C en términos de temperatura T y campo magnético externo B para $q = 6$ y $q = 8$. En las figuras, notamos que existen 2 máximos en estas curvas representando transiciones BKT . Fuente: Propia

(a)



(b)



A continuación, se presentan 'Diagramas de fase' de una red cuadrada 3×3 de spines interactuante y presencia de campo externo B para el modelo Clock $q = 2, 4, 6, 8$. La temperatura crítica cambia según el campo externo a considerar en la selección de reservorios. Las curvas de la figura representan transiciones de fase.

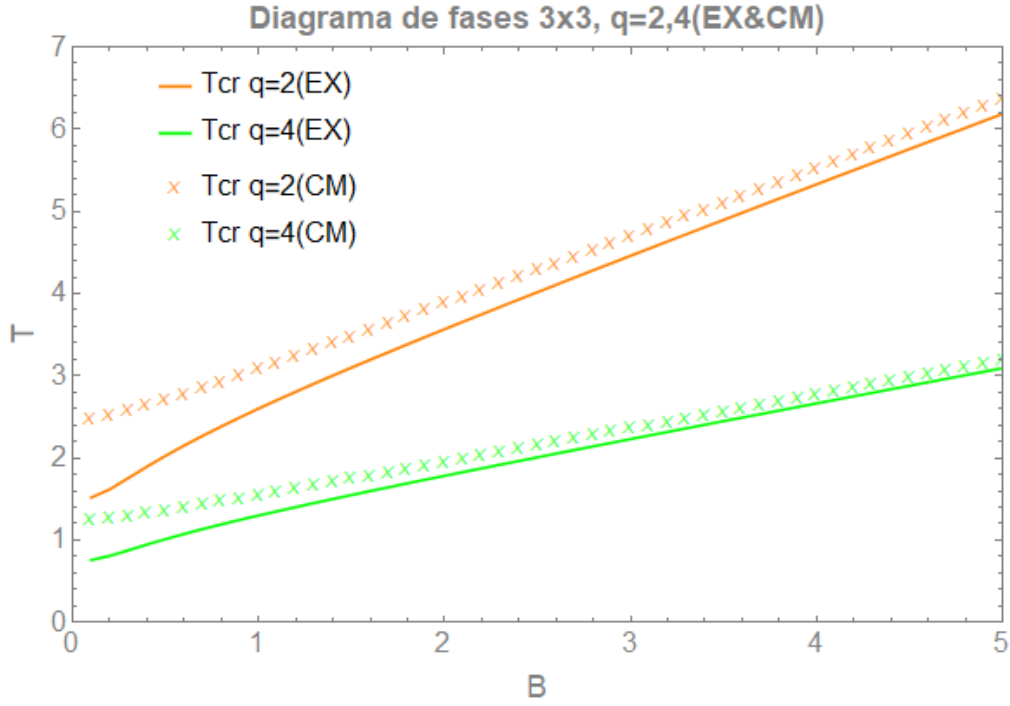


Figura 5.5: Diagrama de fase para $q = 2$ (color naranja) y $q = 4$ (color verde). La curva continua es calculada de forma exacta y las 'x' corresponden a la aproximación mediante teoría de campo medio. Esta figura, representa los máximos del calor específico presentados en la figura 5.2. Se superponen las curvas de $q = 2, 4$, pero si aislamos la líneas 'naranja' del modelo de Ising notamos que bajo la curva (tanto para el caso exacto y aproximado) nos encontramos en una región ordenada FM con correlación de orientaciones a largo alcance y al subir temperatura los spines comienzan a 'desordenarse' hasta llegar a PM. Para $q = 4$ (color verde) notamos una transición similar, con la diferencia de necesitar temperaturas menores para lograr el desorden. Fuente:Propia

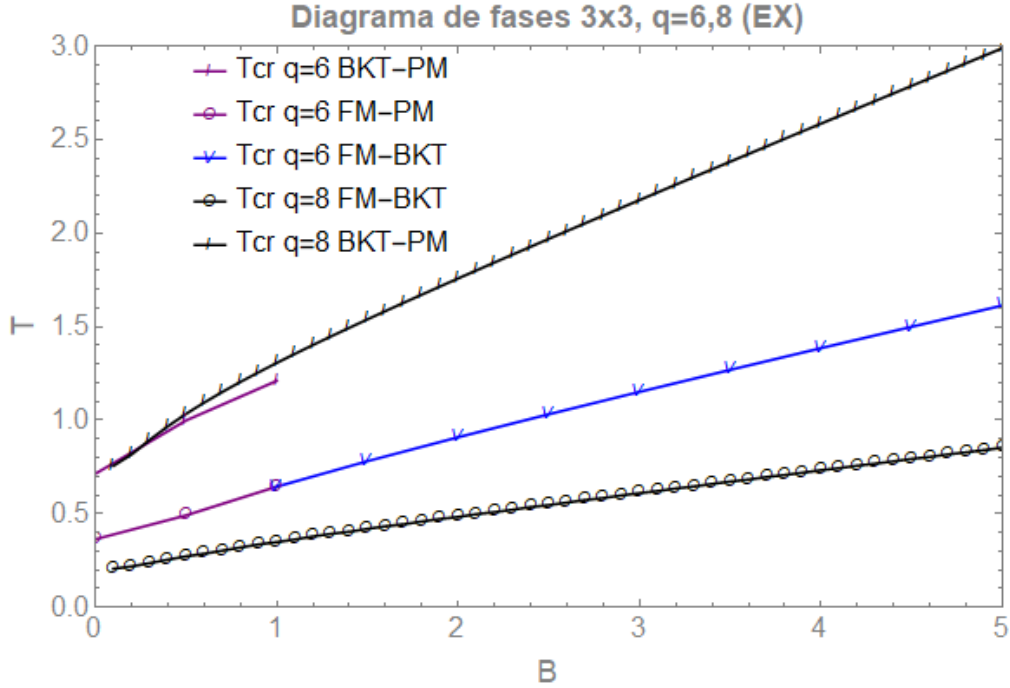


Figura 5.6: Diagrama de fase para $q = 6$ y $q = 8$. Las curvas son calculadas de forma exacta y representan los máximos del calor específico presentados en la figura 6.4. Notamos doble máximo para el calor específico constatando la presencia de una transición intermedia entre FM y PM. Las líneas de color morado muestran la región donde $q = 6$ tiene una fase 'vórtice' hasta cierto valor de campo; luego se presenta una línea color azul representando una transición FM-PM similar a la figura 5.5 (casos $q = 2$ y $q = 4$). Lo anterior se ve reflejado en las curvas de calor específico donde las temperaturas críticas que se encuentren entre $B = 1$ y $B = 2$ presentan una transición de cantidad de máximos de 2 a 1. Para $q = 6$, a bajo campo las transiciones son FM-BKT-PM y después solo FM-PM. Para $q = 8$, líneas color negro, notamos doble máximo a lo largo de todo B denotando una región parcialmente ordenada entre FM y PM. Fuente: Propia

5.3. Reservorios del ciclo

Superponiendo las figuras 5.5 y 5.6, se plantea seleccionar reservorios en base a tres criterios: reservorio de baja temperatura en que el material posea muy baja entropía (estado FM); se debe incluir al menos un cambio de fase para procesos cuasi-estáticos a campo constante y; para la transición de 2 máximos a 1 de $q = 6$, se debe seleccionar un reservorio bajo que considere dominante sólo la región de 1 máximo. Aunque se inicia el estudio con la intención de que todos los modelos, ante el mismo reservorio, transiten entre FM y PM, la región FM de $q = 8$ corresponde a una zona con baja entropía, por lo que, se considera ubicar el reservorio bajo en la fase 'vórtice'.

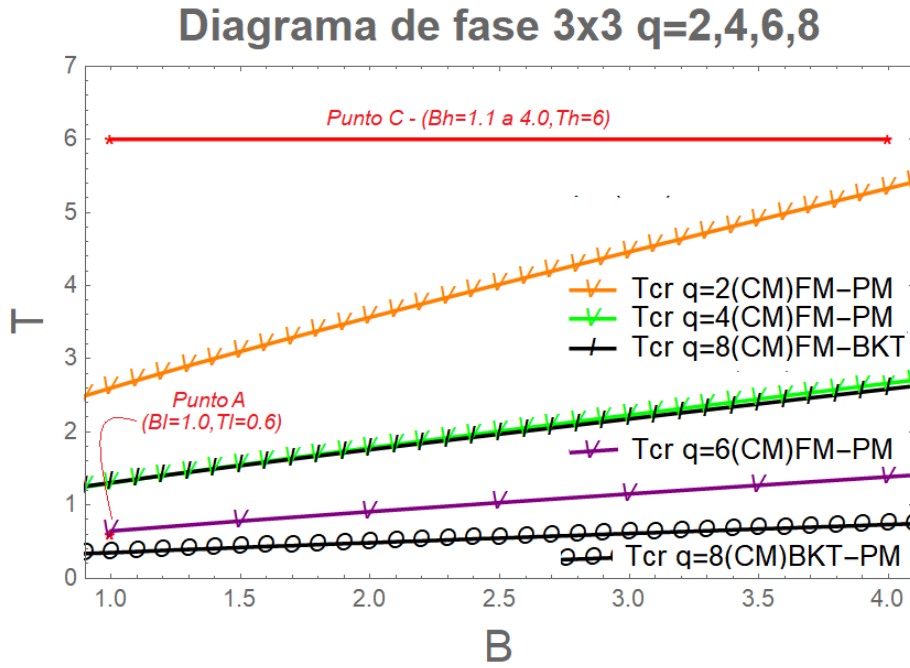


Figura 5.7: Reservorio del ciclo de Otto seleccionado para el estudio. El punto A con $T_l = 0,6$ y $B_l = 1$ muestra que $q = 2, 4, 6$ se encuentra en FM, para $q = 8$ el ciclo comienza en fase 'vórtice'. El punto C está representado con una línea color rojo on $T_h = 6$ dado su caracter móvil tomando valores de B_h entre 0,1 y 4,0. Fuente:Propia

Capítulo 6

Resultados

6.1. Planteamiento

Esta investigación explora el desempeño de un ciclo magnético de Otto con sustancia de trabajo una red cuadrada de tamaño $L \times L$ de spines orientados según modelo Clock.

Se considera un reservorio de estados de baja energía con temperatura $T_l = 0,6$ y campo magnético externo $B_l = 1,0$. Se estima que, para $L = 3$, los 'relojes' se encuentran en fase ordenada o parcialmente ordenada. El reservorio de alta energía se fija con temperatura $T_h = 6,0$, asegurando fase desordenada para todos los relojes, dejando libre el campo magnético externo alto en un rango $B_{hmin} = 1,1$ y $B_{hmax} = 4,0$.

Dado que la forma en que la sustancia de trabajo distribuye el calor y el trabajo es el objetivo del análisis mediante indicadores de desempeño (dependen de la diferencia de energía de los reservorios), se propone encontrar curvas de trabajo neto y eficiencia para responder:

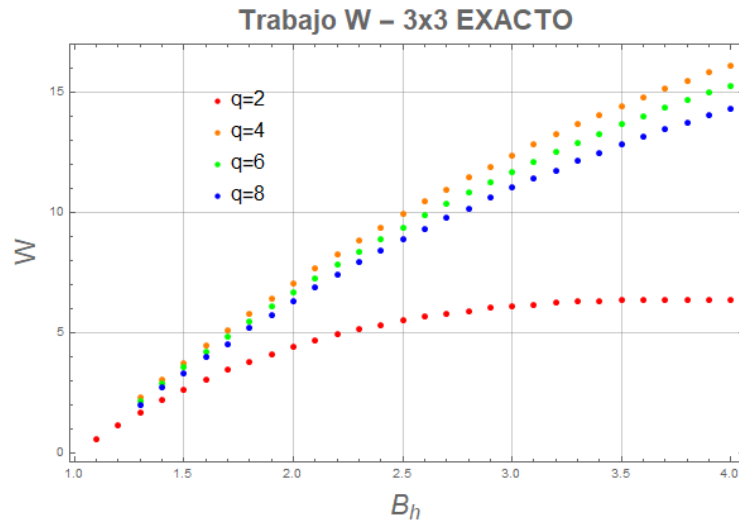
- Para $L = 3$,
 - ¿Cuál q tiene mejor desempeño?
 - ¿Cómo se comporta la aproximación?
- Considerando la teoría de campo medio y $L = 3, 16, 32, 64, 128, 256$
 - ¿Cuál es el rol del tamaño de la red sobre el desempeño de la colección de ciclos?

6.2. q óptimo

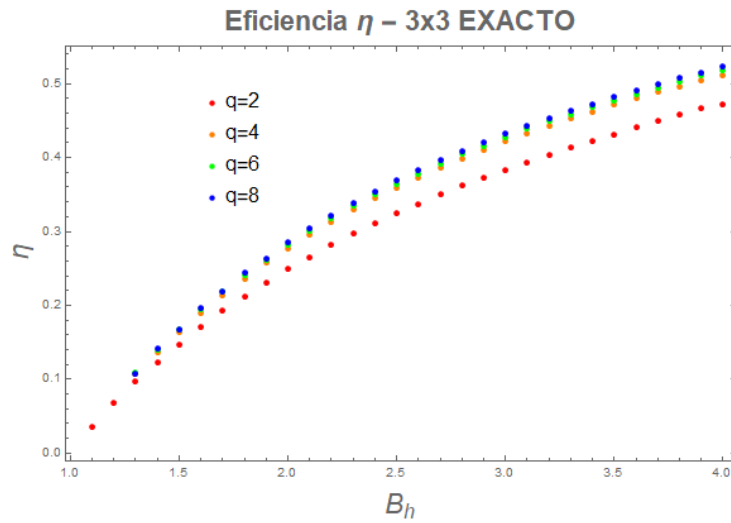
Calculando la solución exacta para $L = 3$, se presentan las curvas de desempeño del 'motor' para $q = 2, 4, 6, 8$.

Figura 6.1: Desempeño ciclo de Otto para red 3×3 , caso exacto. Fuente:Propia

(a) Trabajo neto versus campo alto. Notamos que en el rango B_h de análisis, la curva de $q = 2$ tiene el peor desempeño. las curvas de $q = 4, 6, 8$ van disminuyendo el trabajo neto obtenido mientras aumenta q .



(b) Eficiencia versus campo alto. Notamos que en el rango B_h de análisis, la eficiencia es proporcional al tamaño de q en todo el dominio del estudio.



6.3. Exacto versus aproximado

A lo largo del estudio hemos revisado algunas características de la teoría de campo medio aplicada al modelo Clock; por ejemplo, despreciar fluctuaciones de energía, que su aproximación de energía interna mejora mientras aumenta q y que la cantidad de vecinos cercanos para el término de exchange tiende a 4 mientras la resolución de la red crece. Se propone calcular el desempeño de los relojes, a través de esta aproximación, para ser comparados con el resultado exacto.

Bh	Campo Medio		Exacto	
	W	η	W	η
$q = 2$				
1.1	0.6	4 %	0.6	4 %
1.2	1.2	7 %	1.2	8 %
1.3	1.7	10 %	1.8	11 %
1.4	2.2	12 %	2.3	14 %
1.5	2.7	15 %	2.8	17 %
1.6	3.1	17 %	3.3	19 %
1.7	3.5	19 %	3.7	22 %
1.8	3.8	21 %	4.1	24 %
1.9	4.1	23 %	4.5	26 %
2	4.4	25 %	4.8	28 %
2.1	4.7	27 %	5.1	30 %
2.2	4.9	28 %	5.4	31 %
2.3	5.2	30 %	5.6	33 %
2.4	5.3	31 %	5.8	34 %
2.5	5.5	32 %	6.0	36 %
2.6	5.7	34 %	6.2	37 %
2.7	5.8	35 %	6.3	39 %
2.8	5.9	36 %	6.5	40 %
2.9	6.0	37 %	6.6	41 %
3	6.1	38 %	6.7	42 %
3.1	6.2	39 %	6.8	43 %
3.2	6.2	40 %	6.8	44 %
3.3	6.3	41 %	6.9	45 %
3.4	6.3	42 %	6.9	46 %
3.5	6.4	43 %	7.0	47 %
3.6	6.4	44 %	7.0	48 %
3.7	6.4	45 %	7.0	49 %
3.8	6.4	46 %	7.0	49 %
3.9	6.4	47 %	7.0	50 %
4	6.4	47 %	6.9	51 %

Bh	Campo Medio		Exacto	
	W	η	W	η
$q = 4$				
1.1			0.8	4 %
1.2			1.6	8 %
1.3	2.3	11 %	2.3	11 %
1.4	3.0	14 %	3.1	14 %
1.5	3.8	16 %	3.8	17 %
1.6	4.5	19 %	4.5	20 %
1.7	5.1	21 %	5.2	23 %
1.8	5.8	24 %	5.9	25 %
1.9	6.4	26 %	6.5	27 %
2	7.1	28 %	7.2	29 %
2.1	7.7	30 %	7.8	31 %
2.2	8.3	31 %	8.4	33 %
2.3	8.8	33 %	9.0	35 %
2.4	9.4	34 %	9.6	36 %
2.5	9.9	36 %	10.1	38 %
2.6	10.5	37 %	10.7	39 %
2.7	11.0	39 %	11.2	41 %
2.8	11.4	40 %	11.7	42 %
2.9	11.9	41 %	12.2	43 %
3	12.4	42 %	12.7	44 %
3.1	12.8	43 %	13.1	46 %
3.2	13.2	44 %	13.6	47 %
3.3	13.7	45 %	14.0	48 %
3.4	14.0	46 %	14.4	49 %
3.5	14.4	47 %	14.8	50 %
3.6	14.8	48 %	15.2	50 %
3.7	15.1	49 %	15.5	51 %
3.8	15.5	50 %	15.9	52 %
3.9	15.8	50 %	16.2	53 %
4	16.1	51 %	16.5	54 %

Tabla 6.1: Tabla con trabajo neto extraído y eficiencia para la colección de ciclos (B_h) para $q = 2, 4$. Fuente:Propia.

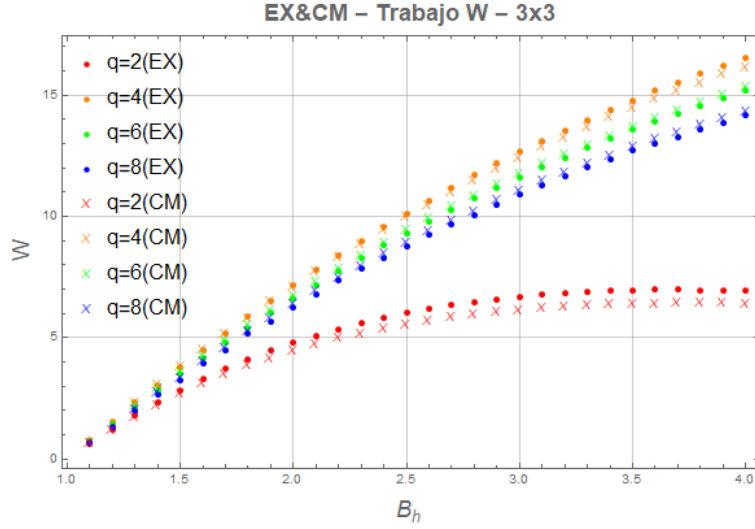
Bh	Campo Medio		Exacto	
	W	η	W	η
$q = 6$				
1.1			0.7	4 %
1.2			1.4	8 %
1.3	2.2	11 %	2.1	11 %
1.4	2.9	14 %	2.8	15 %
1.5	3.6	17 %	3.5	18 %
1.6	4.2	19 %	4.2	20 %
1.7	4.9	22 %	4.8	23 %
1.8	5.5	24 %	5.4	25 %
1.9	6.1	26 %	6.0	28 %
2	6.7	28 %	6.6	30 %
2.1	7.3	30 %	7.2	32 %
2.2	7.8	32 %	7.7	33 %
2.3	8.4	33 %	8.3	35 %
2.4	8.9	35 %	8.8	37 %
2.5	9.4	36 %	9.3	38 %
2.6	9.9	38 %	9.8	40 %
2.7	10.4	39 %	10.3	41 %
2.8	10.8	40 %	10.7	42 %
2.9	11.3	42 %	11.2	44 %
3	11.7	43 %	11.6	45 %
3.1	12.1	44 %	12.0	46 %
3.2	12.5	45 %	12.4	47 %
3.3	12.9	46 %	12.8	48 %
3.4	13.3	47 %	13.2	49 %
3.5	13.6	48 %	13.6	50 %
3.6	14.0	49 %	13.9	51 %
3.7	14.3	49 %	14.2	52 %
3.8	14.7	50 %	14.6	53 %
3.9	15.0	51 %	14.9	54 %
4	15.3	52 %	15.2	54 %

Bh	Campo Medio		Exacto	
	W	η	W	η
$q = 8$				
1.1			0.7	4 %
1.2			1.3	8 %
1.3	2.0	11 %	2.0	11 %
1.4	2.7	14 %	2.7	15 %
1.5	3.3	17 %	3.2	17 %
1.6	4.0	20 %	3.9	20 %
1.7	4.5	22 %	4.5	23 %
1.8	5.2	24 %	5.2	26 %
1.9	5.8	26 %	5.7	28 %
2	6.3	29 %	6.3	30 %
2.1	6.9	30 %	6.8	32 %
2.2	7.4	32 %	7.4	34 %
2.3	7.9	34 %	7.9	35 %
2.4	8.4	35 %	8.3	37 %
2.5	8.9	37 %	8.8	38 %
2.6	9.3	38 %	9.2	40 %
2.7	9.8	40 %	9.7	41 %
2.8	10.2	41 %	10.1	42 %
2.9	10.6	42 %	10.5	44 %
3	11.0	43 %	10.9	45 %
3.1	11.4	44 %	11.3	46 %
3.2	11.7	45 %	11.7	47 %
3.3	12.1	46 %	12.0	48 %
3.4	12.5	47 %	12.4	49 %
3.5	12.8	48 %	12.7	50 %
3.6	13.1	49 %	13.0	51 %
3.7	13.4	50 %	13.3	52 %
3.8	13.7	51 %	13.6	53 %
3.9	14.0	52 %	13.9	54 %
4	14.3	52 %	14.1	54 %

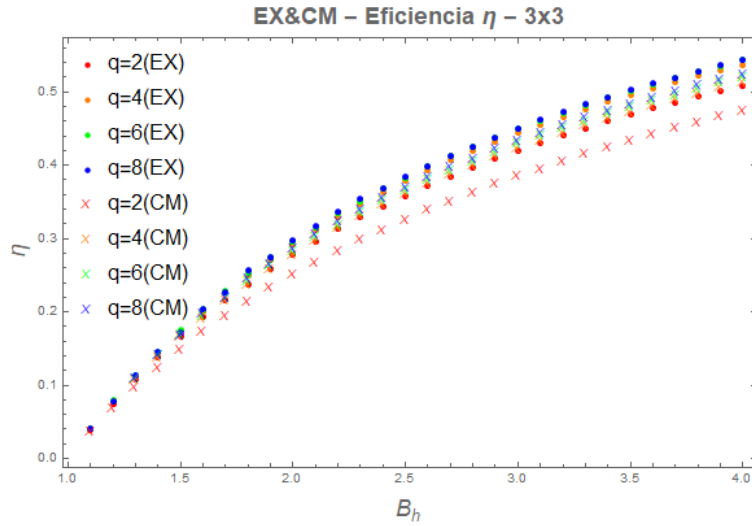
Tabla 6.2: Tabla con trabajo neto extraído y eficiencia para la colección de ciclos (B_h) para $q = 6, 8$. Fuente:Propia.

Figura 6.2: Desempeño exacto versus estimado. Fuente:Propia

(a) Trabajo neto versus campo alto obtenidos de forma exacta y aproximada vía campo medio $L = 3$. Notamos un resultado similar entre los métodos y las diferencias disminuyen mientras q crece. Para $q = 2, 4$, el cálculo exacto es una cota superior del desempeño de campo medio. Lo anterior, para $q = 6, 8$, muestra comportamiento opuesto obteniendo mayor trabajo neto la aproximación.



(b) Eficiencia versus campo alto obtenidos de forma exacta y aproximada vía campo medio $L = 3$. La eficiencia muestra comportamientos similares en ambos métodos. El caso exacto es un límite superior, ante los reservorios determinados, para la aproximación.



6.4. Rol del tamaño de la red

La física exótica en las transiciones de fase de orden magnético se vislumbra en el hamiltoniano exacto, así como, en el hamiltoniano de campo medio. Dado el bajo costo de cálculo del método aproximado, respecto el exacto, y la tendencia a disminuir diferencias mientras q y o L crecen, se ha estimado que campo medio es un buen candidato para presentar esta parte del estudio.

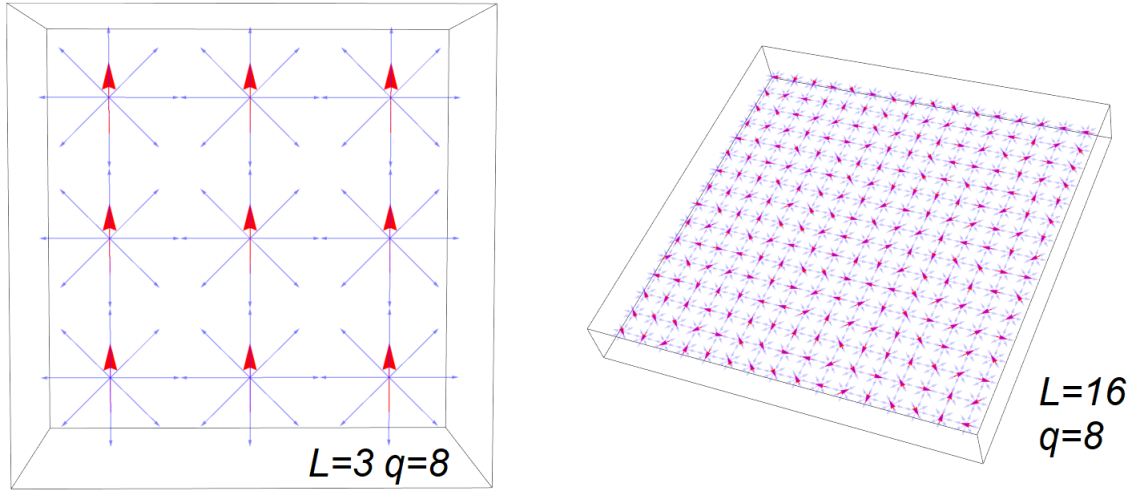


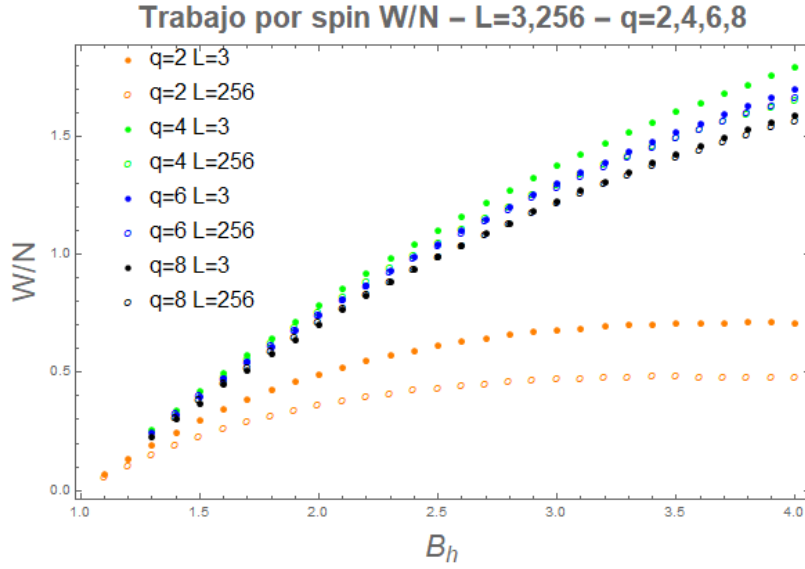
Figura 6.3: Visualización de redes de spin con $q = 8$ para distintas resoluciones (izquierda $L = 3$ ordenado, derecha $L = 16$ desordenado). Fuente:Propia.

Con objetivo comparar q y L , se propone escalar el trabajo neto a 'trabajo por spin', cual se logra dividiendo el trabajo por el número de partículas N ($L \times L$).

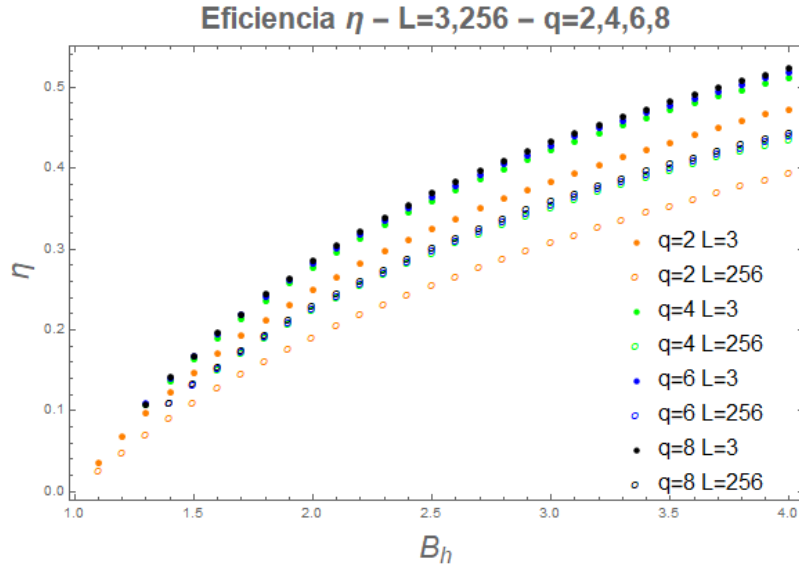
Se calcula el trabajo para $q = 2, 4, 6, 8$ y $L = 3, 16, 32, 64, 128, 256$ obteniendo 24 curvas de trabajo por spin. Las curvas muestran un aumento de la tendencia para cada q mientras L crece. Por otro lado, las diferencias disminuyen mientras q crece, es decir, el rol de la red pierde protagonismo más para $q = 8$ que para $q = 2$.

Figura 6.4: Desempeño por spin para redes 3×3 y 256×256 . Fuente: Propia.

(a) Trabajo por spin versus campo alto. Notamos que para $L = 3$, el trabajo por spin obtenido es mayor que para $L = 256$ para todos los q del estudio. Existe una región para $L = 256$ donde el ciclo con mejor desempeño es $q = 6$.



(b) Eficiencia versus campo alto. Fijada la red, la eficiencia mantiene su comportamiento con $q = 8$ como mayor valor para toda la colección de ciclos. Para $L = 256$ existe un rango hasta $B_h < 1,7$, donde pareciese que $q = 4, 6, 8$ son isoeicientes.



Capítulo 7

Conclusiones

7.1. Conclusiones

Se ha obtenido, por primera vez hasta la fecha de cierre de este estudio, un ciclo termodinámico de Otto considerando un modelo efectivo de spin 'reloj' de q -estados para red cuadrada $L \times L$ con bordes no interactuantes. La restricción del motor, donde limita lo expresado en este capítulo, se dispone en los reservorios: temperatura baja $T_l = 0,6$ - alta $T_h = 0,4$ y campo externo bajo $B_l = 1$ - alto $B_h = 1,1$ a $4,0$.

Acorde a los resultados obtenidos en lo investigado, se concluyen las siguientes propuestas:

- Para una red cuadrada $L = 3$, el modelo Clock $q = 4$ tiene el mejor desempeño, como trabajo W o como producto entre trabajo y eficiencia $W \times \eta$, para la colección de ciclos con libertad campo externo alto B_h . Cada ciclo muestra eficiencia proporcional a la libertad de discretización q del modelo, por lo que, $q = 8$ tiene mejor eficiencia en la colección de ciclos.
- Para una red cuadrada $L = 3$, considerando vecinos cercanos efectivos z_{eff} (en relación al tamaño de la red según lo expuesto en la redefinición del hamiltoniano aproximado), campo medio aproxima comportamientos similares en la obtención de trabajo y eficiencia respecto resultados exactos. Los gráficos de desempeño en términos de B_h muestran desplazamientos relacionados al tamaño de q (la diferencia de lo comparado disminuye mientras q aumenta), por ejemplo la diferencia de eficiencia para $q = 2$ entre exacto y campo medio es mayor que la diferencia para $q = 4$, y así sucesivamente; en general, campo medio muestra menor trabajo obtenido respecto el caso exacto para todo $q = 2, 4, 6, 8$.

- En el marco de la aproximación de campo medio con z_{eff} , el trabajo por spin obtenido para los ciclos propone al modelo $q = 4$ con mejor desempeño independiente del tamaño de la red ($L = 3, 16, 32, 64, 128, 256$). De alguna forma, los bordes pierden relevancia mientras L crece con tendencia de cantidad de vecinos tal que $z_{eff} \rightarrow 4$.
- En el marco de la aproximación de campo medio con z_{eff} , el rol del tamaño de la red disminuye mientras crece el tamaño de q , es decir, la diferencia para $q = 2$ entre el trabajo obtenido para $L = 3$ y $L = 16$ es menor que para $q = 4$, y así sucesivamente. La eficiencia se muestra sensible al tamaño de la red, disminuyendo mientras esta crece.

7.2. Más allá del estudio

Nueva física puede estar presente en extensiones de este estudio. Se plantean, como base de discusiones que rotan en el marco de este estudio, propuestas para investigaciones futuras.

- *El rol de la anisotropía.* La anisotropía está presente en todos los materiales y en el estudio (capítulo 2) se indica una forma de incorporar este acople al modelo efectivo. Para la investigación se considera parámetro anisotrópico nulo, $K = 0$. Se propone considerar un parámetro $\mathcal{K} = 1$ con unidades de energía y orientado paralelo al campo externo ($\widehat{n}_K = (0, 1)$) o perpendicular al mismo ($\widehat{n}_K = (1, 0)$).
- *Campo externo con orientación variable.* Desde el punto de vista del material se puede considerar un campo externo con libertad de orientación.
- *Exchange antiferromagnético.* El término en el hamiltoniano relacionado a 'exchange' se puede explorar con magnitud negativa distinguiéndose al estudio (con $\mathcal{J}$ positiva), en principio, en el histograma de energía, es decir, en la función de partición.
- *No considerar procesos en equilibrio cuasi-estático (tiempo finito).* Una breve descripción se comparte en el capítulo 4 Ciclo de Otto del estudio mostrando una práctica integración a la presente metodología de trabajo.
- *Considerar próximos vecinos cercanos.* Con una redefinición de los vecinos considerados en el acoplamiento $\mathcal{J}$, en consecuencia, en los vecinos efectivos z_{eff} de la teoría de campo medio, o en el efecto similar en la simulación de Monte Carlo, se explora un nuevo espacio de parámetros.

- *Formas y singularidades de la red.* Otros tipos de red (hexagonales, triangulares, etc), otras condiciones de borde (cíclicas, con interacción variable, etc) u consideración de singularidades en la lattice representando vacancia de átomos en la sustancia de trabajo.
- *Considerar acoplamiento dipolo-dipolo de largo alcance.* Se estima que esta exploración afecta a las transiciones *BKT*.

Capítulo 8

Anexos

8.1. Sobre los anexos

Se presenta una breve descripción de la herramienta para simulación vía Monte Carlo en el contexto del estudio de fenómenos ferromagnéticos. Por otro lado, se disponen gráficos ocupados de forma indirecta en el estudio. Finalmente, se presenta enlaces web con videos que muestran la metodología del estudio en 'movimiento'.

8.2. Nota sobre Monte Carlo

La obtención de observables mediante una simulación de Monte Carlo es una herramienta fundamental para el análisis del fenómeno ferromagnético, a mediados del siglo 20, se proponen aproximaciones numéricas para el modelo mediante procesos estocásticos. [20] [23] [28] [55]

La aproximación de observables termodinámicos puede obtenerse a través del promedio de una muestra de configuraciones de la red. Los datos simulados corresponden a un grupo de configuraciones aleatorias y con ellos la pregunta ¿estos puntos caracterizan el problema?, en la región que se encuentra ¿están los casos más probables?. Debemos seleccionar un sector del espacio de configuraciones x_l que contengan la familia de puntos que representen las máximas probabilidades de ser punto de equilibrio térmico. Estos máximos en promedio son los observables termales.

Si consideramos el promedio termal de un observable A en un ensamble canónico, cual conocemos todos los estados, entonces existe un finito grupo de puntos en el espacio de configuraciones (x_l) que tienden a ser los más probables, peak de probabilidad de ser puntos de equilibrio del sistema. Podemos escoger una muestra m contenida en x_l que representan en promedio la propiedad termal de la colección de puntos de equilibrio y aproximadamente la expectativa del observable del sistema.

$$\langle A(x) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{state\ j} e^{-\beta \mathcal{H}_j} A(x) \approx \frac{1}{m} \sum_{m\ j} A(x_{lj}) = \langle A(x_l) \rangle \quad (8.1)$$

No es difícil escoger la muestra correcta conociendo x_l . Pero ¿cómo seleccionar la muestra desde todas las posibilidades tal que representen un peak de probabilidad de ser punto de equilibrio térmico?. Algoritmo de Metrópolis.

Sobre caminos estocásticos con selección de Metropolis, necesitamos representar la variación de la trayectoria estocástica del sistema usando procesos de Markov donde cada estado sucesivo x_{u+1} dependa del estado anterior x_u y una probabilidad de transición $W_{u \rightarrow u+1}$. El equilibrio se esclarece al tener la misma probabilidad ir de $u \rightarrow u+1$ a la de $u+1 \rightarrow u$. Lo anterior se presenta al igualar el estado siguiente de 2 sucesos cercanos; se presenta una expresión de la condición.

$$P(x_u)W_{u \rightarrow u+1} = P(x_{u+1})W_{u+1 \rightarrow u} \quad (8.2)$$

La probabilidad de transición dependerá de la diferencia de energía entre

2 estados sucesivos.

$$\frac{W_{u \rightarrow u+1}}{W_{u+1 \rightarrow u}} = e^{-\beta \delta \mathcal{H}} \quad (8.3)$$

Los caminos estocásticos quedan restringidos a que la probabilidad de transición tome un valor para cuando la energía decae y la unidad si no decae.

$$W(\mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2) = \begin{cases} e^{-\beta(\mathcal{H}_2 - \mathcal{H}_1)} & \text{si } \mathcal{H}_2 < \mathcal{H}_1 \\ 1 & \text{si } \textit{otro} \end{cases} \quad (8.4)$$

Para el estudio se prueba el método asegurando la independencia aleatoria de un dato de la muestra a través de un proceso de variación aleatoria de spines de cada nodo. Este proceso se realiza 10.000 veces por dato de muestra y corresponde a la condición inicial de la búsqueda que promedia 300.000 veces.

El estado inicial de la termalización se considera con todos los spines en fijos en $2\pi/q$ y los escalares obtenidos son:

- Temperatura
- Energia Interna
- Calor Especifico
- Magnetizacion en X
- Magnetizacion en Y
- Magnetizacion MM: $\sqrt{M_x^2 + M_y^2}$
- Suceptibilidad en X
- Suceptibilidad en Y
- Suceptibilidad a partir de MM
- N° de promedios
- N° de configuraciones aceptadas (en promedios)

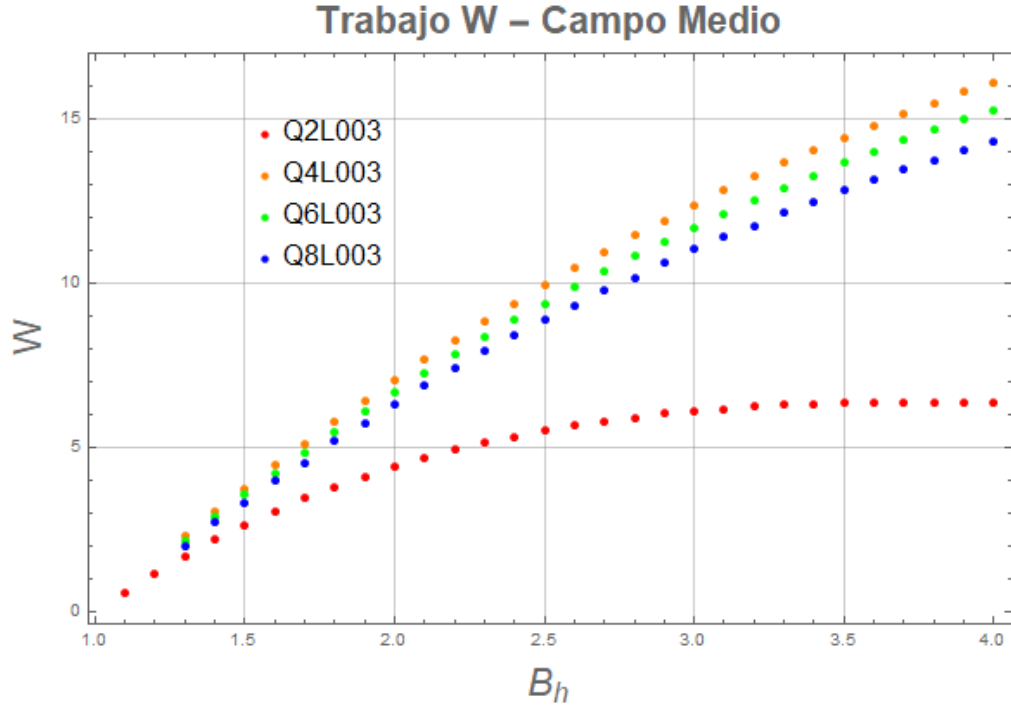
Con el output del simulador se propone encontrar una aproximación de la entropía del sistema según la siguiente expresión:

$$S(B, T) = \int_0^T \frac{C(0, t)}{t} dt + \frac{U(B, T) - U(0, T)}{T} + \frac{\int_0^B M(b, T) db}{T} + \delta_{B=0} \log(q) \quad (8.5)$$

8.3. Gráficos

- Trabajo neto y eficiencia $L = 3$ para $q = 2, 4, 6, 8$.
- Trabajo neto y eficiencia $L = 16$ para $q = 2, 4, 6, 8$.
- Trabajo neto y eficiencia $L = 32$ para $q = 2, 4, 6, 8$.
- Trabajo neto y eficiencia $L = 64$ para $q = 2, 4, 6, 8$.
- Trabajo neto y eficiencia $L = 128$ para $q = 2, 4, 6, 8$.
- Trabajo neto y eficiencia $L = 256$ para $q = 2, 4, 6, 8$.
- Trabajo por spin $q = 2, 4$.
- Trabajo por spin $q = 6, 8$.
- Trabajo por spin y eficiencia $L = 3, 256$ y $q = 2, 4, 6, 8$.
- Trabajo por spin y eficiencia $L = 3, 256$ y $q = 2, 4, 8$.

(a) Trabajo neto $L = 3$ para $q = 2, 4, 6, 8$.



(b) Eficiencia $L = 3$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

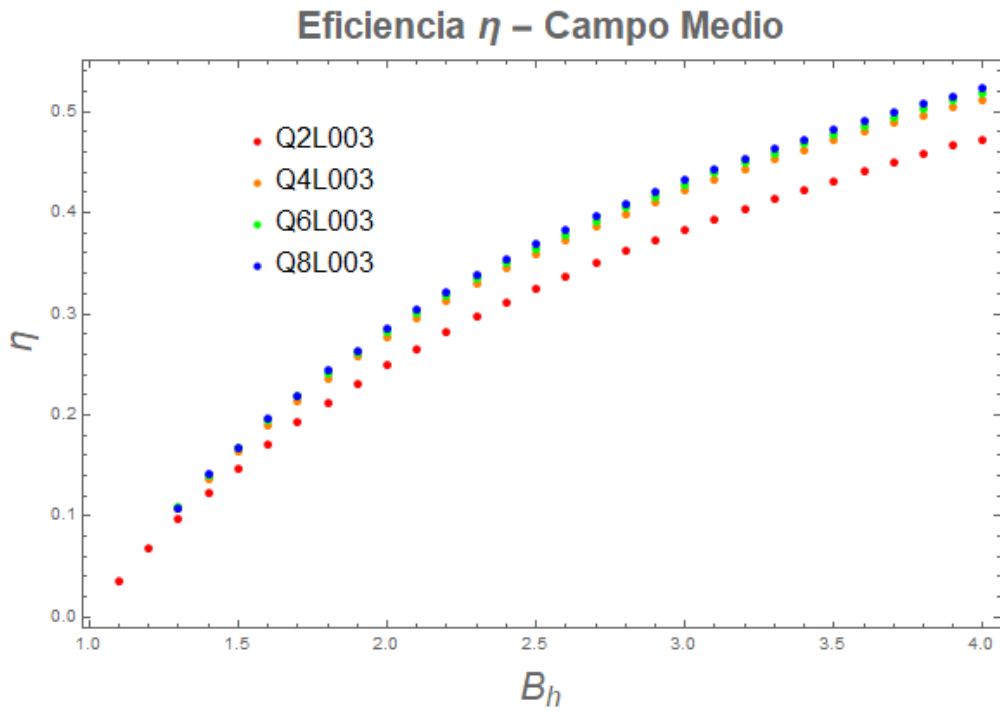
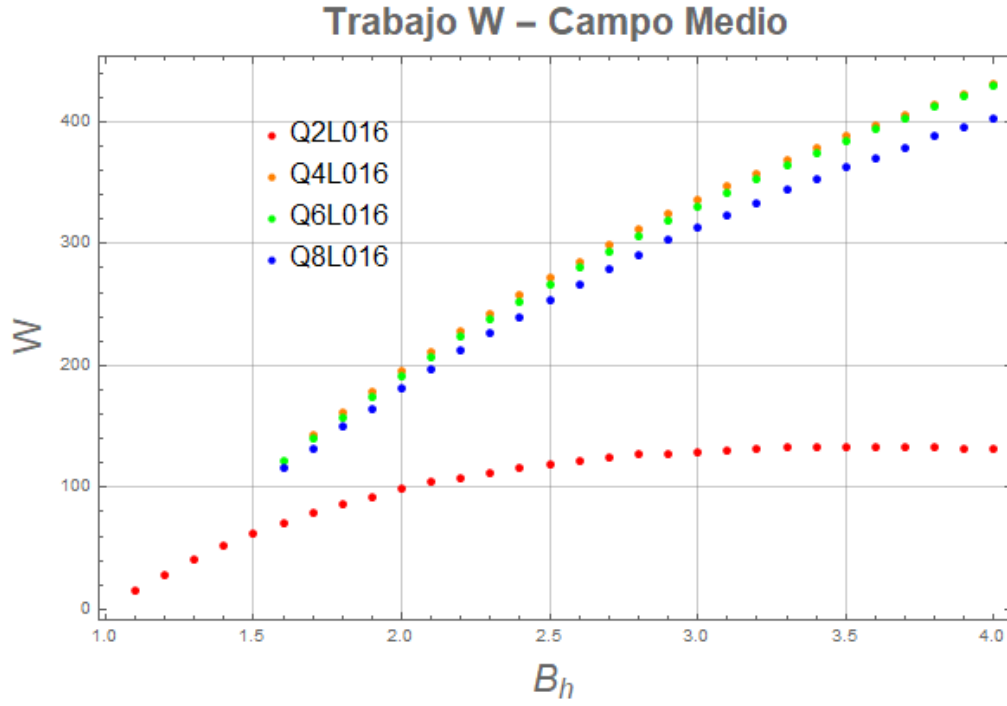


Figura 8.1: $L = 3$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

(a) Trabajo neto $L = 16$ para $q = 2, 4, 6, 8$.



(b) Eficiencia $L = 16$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

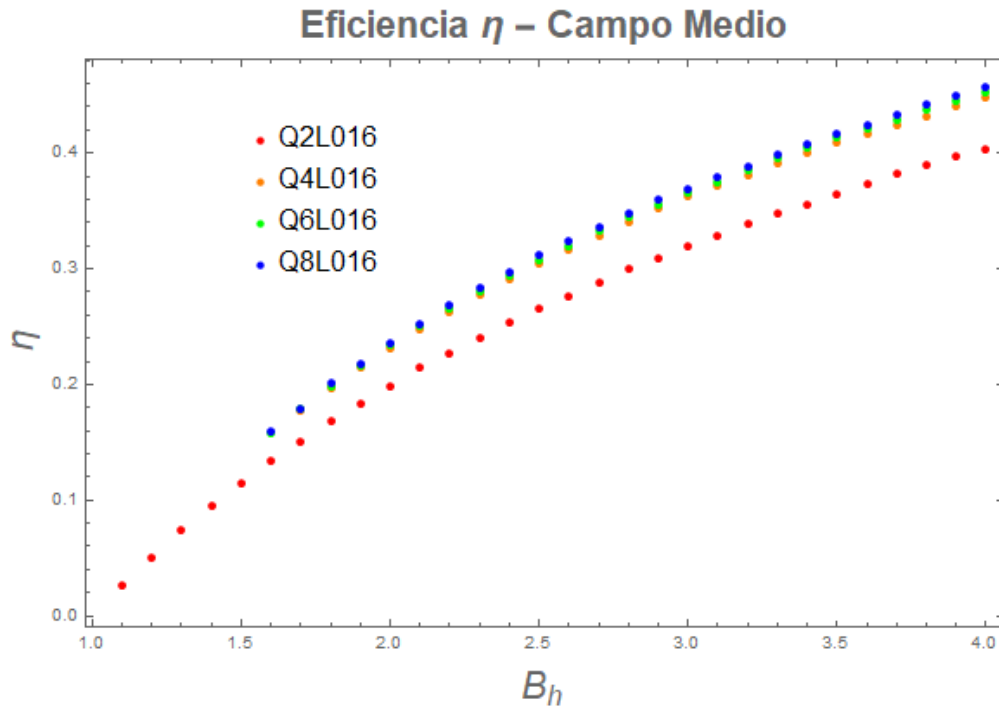
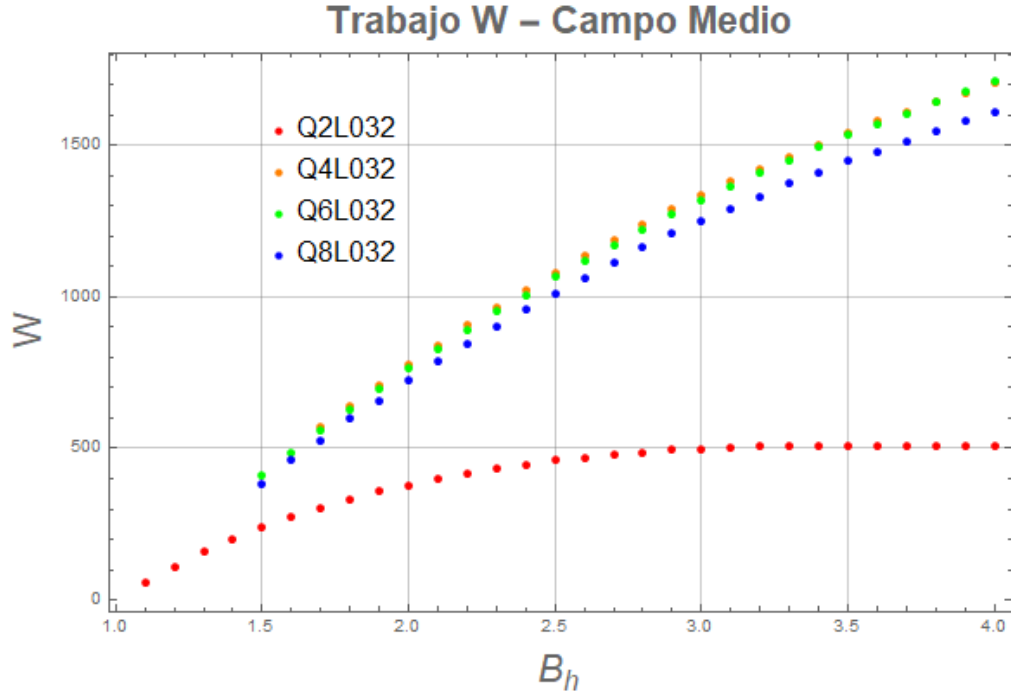


Figura 8.2: $L = 3$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

(a) Trabajo neto $L = 32$ para $q = 2, 4, 6, 8$.



(b) Eficiencia $L = 32$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

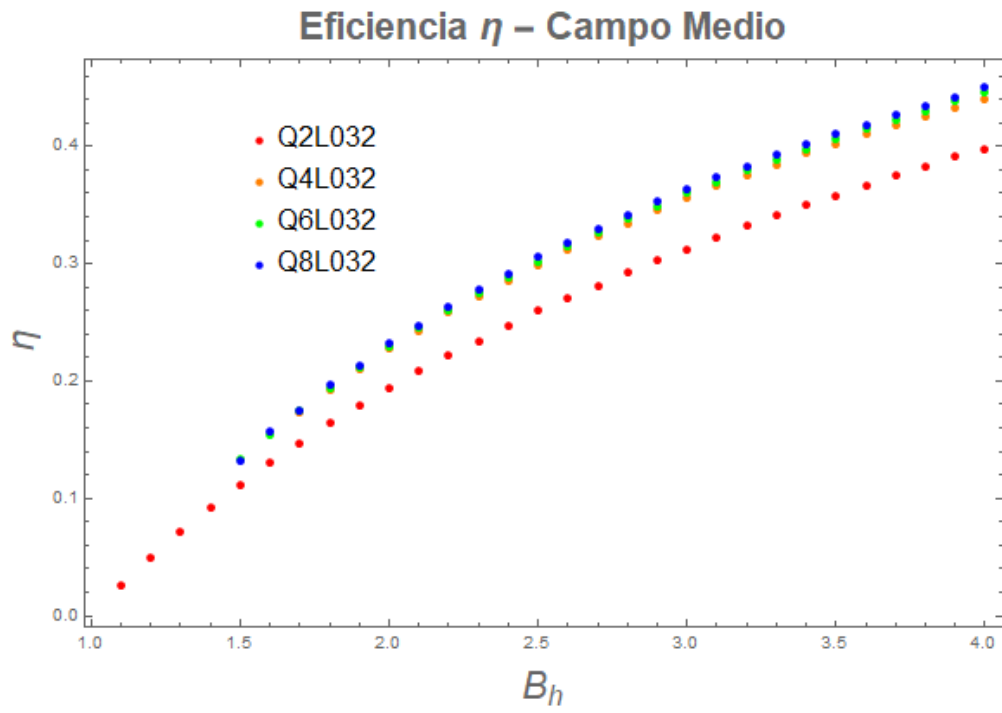
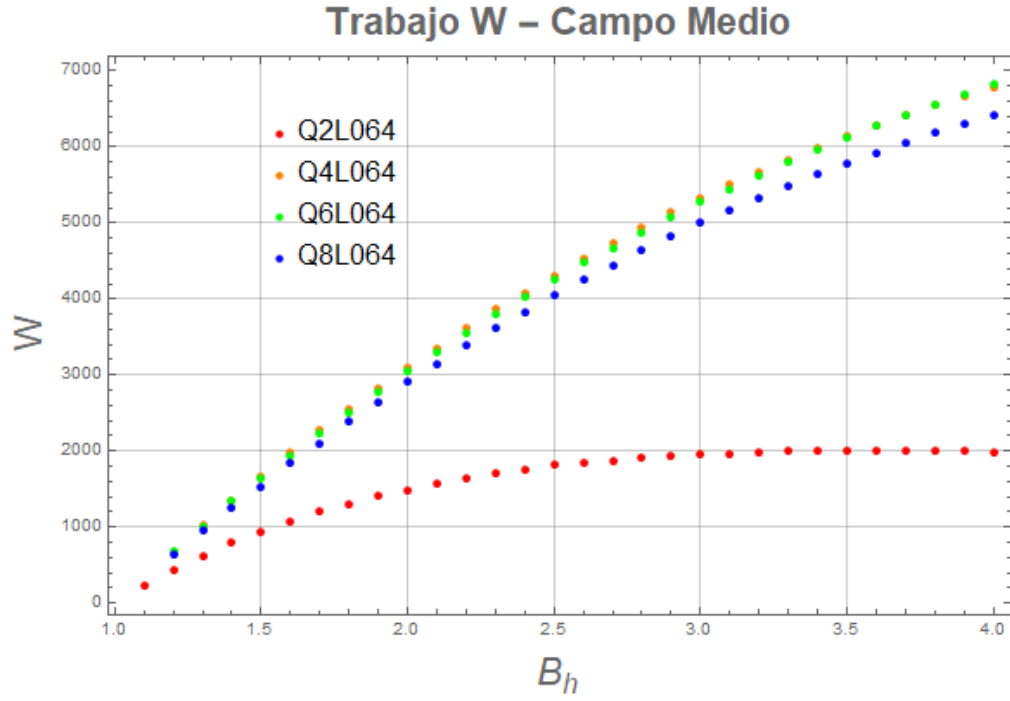
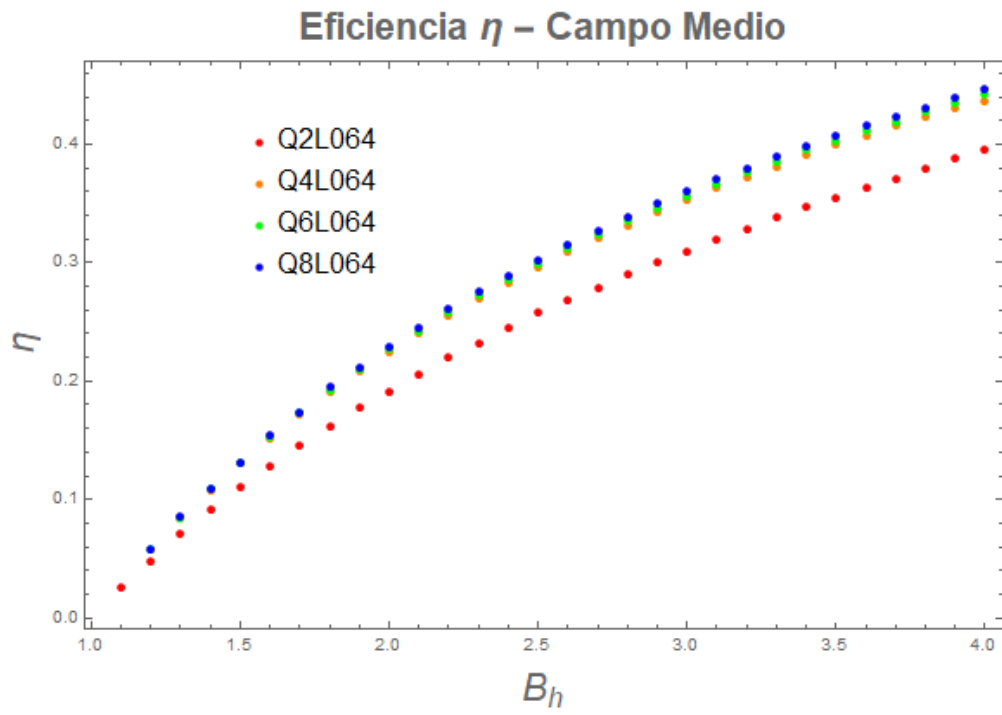
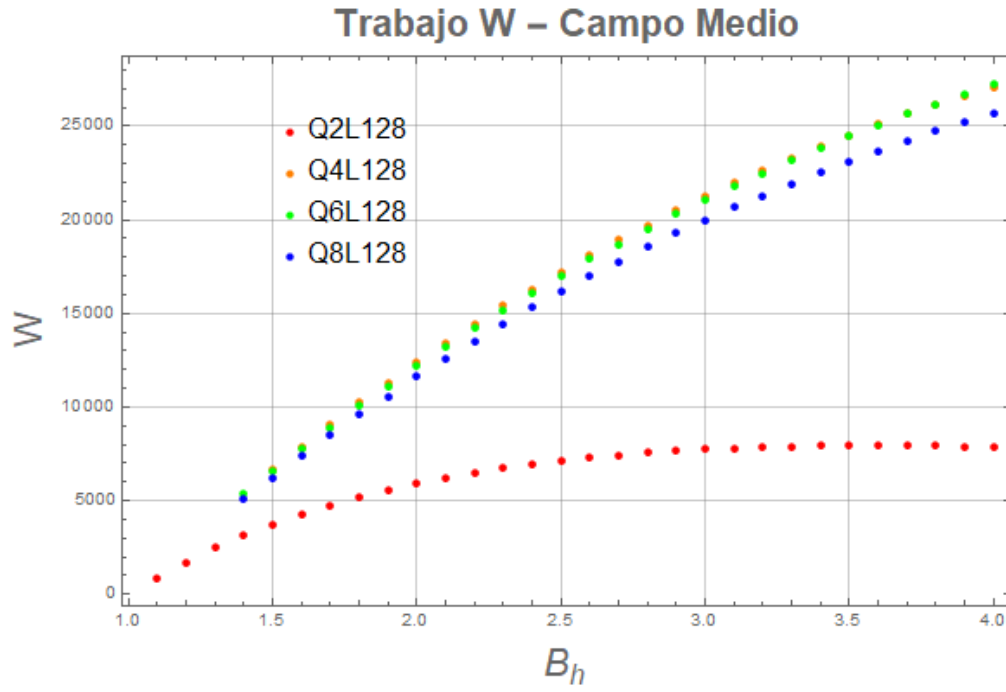


Figura 8.3: $L = 32$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

(a) Trabajo neto $L = 64$ para $q = 2, 4, 6, 8$.(b) Eficiencia $L = 64$ para $q = 2, 4, 6, 8$.Figura 8.4: $L = 64$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

(a) Trabajo neto $L = 128$ para $q = 2, 4, 6, 8$.



(b) Eficiencia $L = 128$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

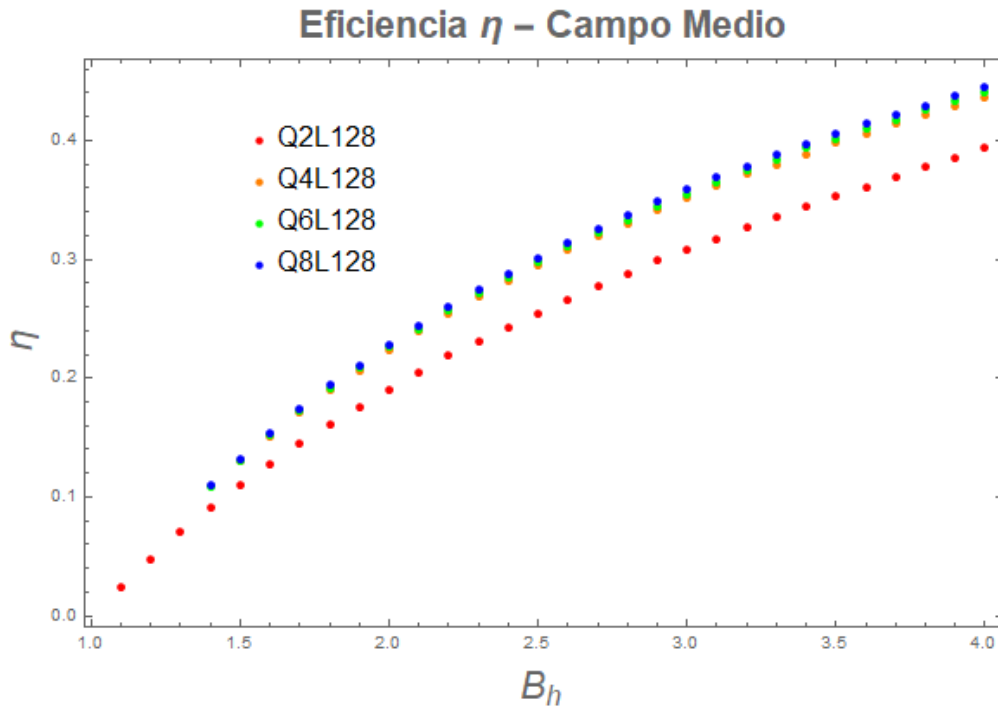
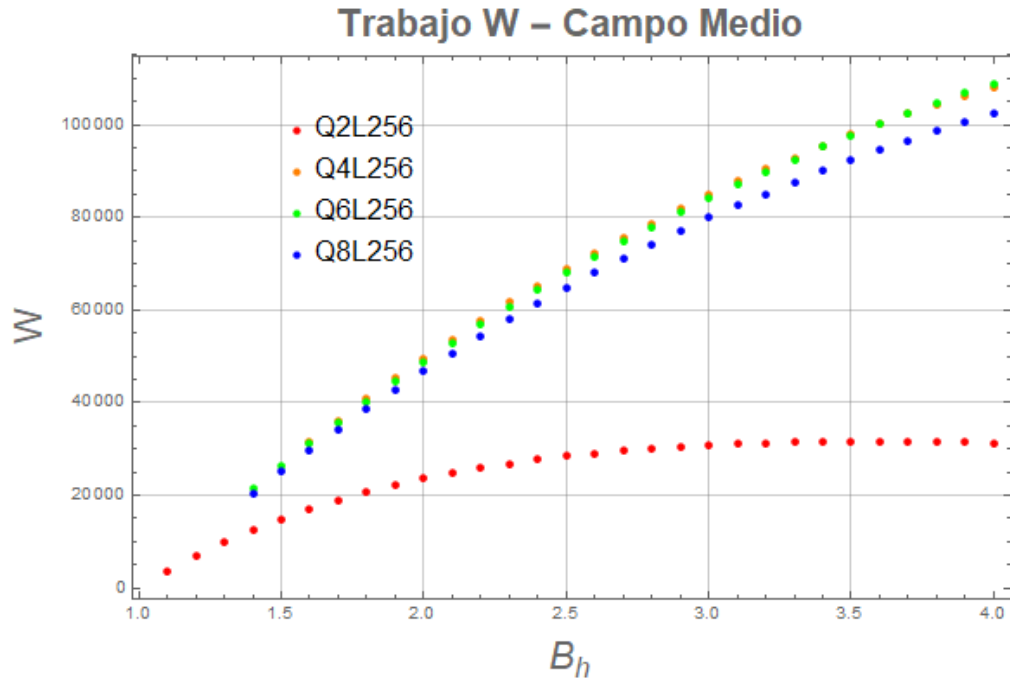


Figura 8.5: $L = 128$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

(a) Trabajo neto $L = 256$ para $q = 2, 4, 6, 8$.



(b) Eficiencia $L = 256$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

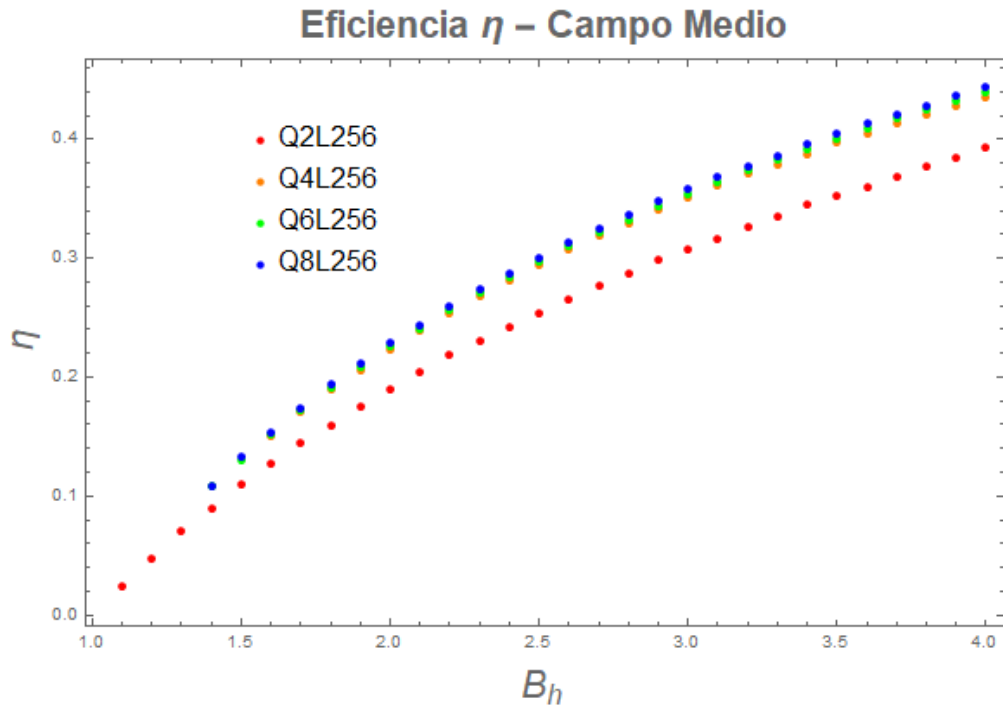
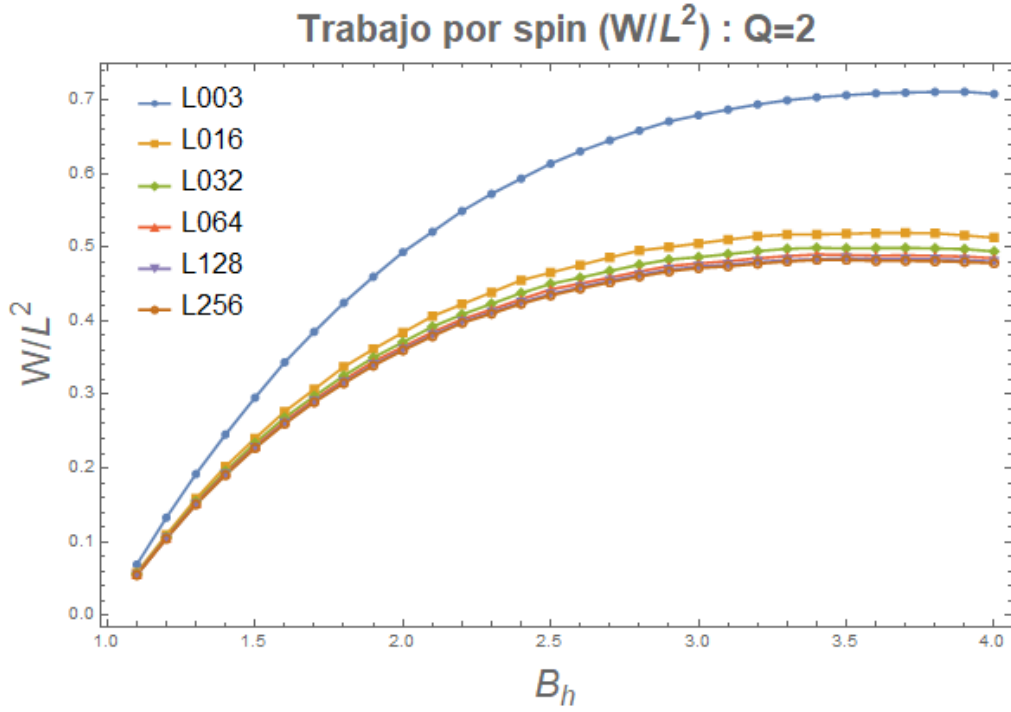
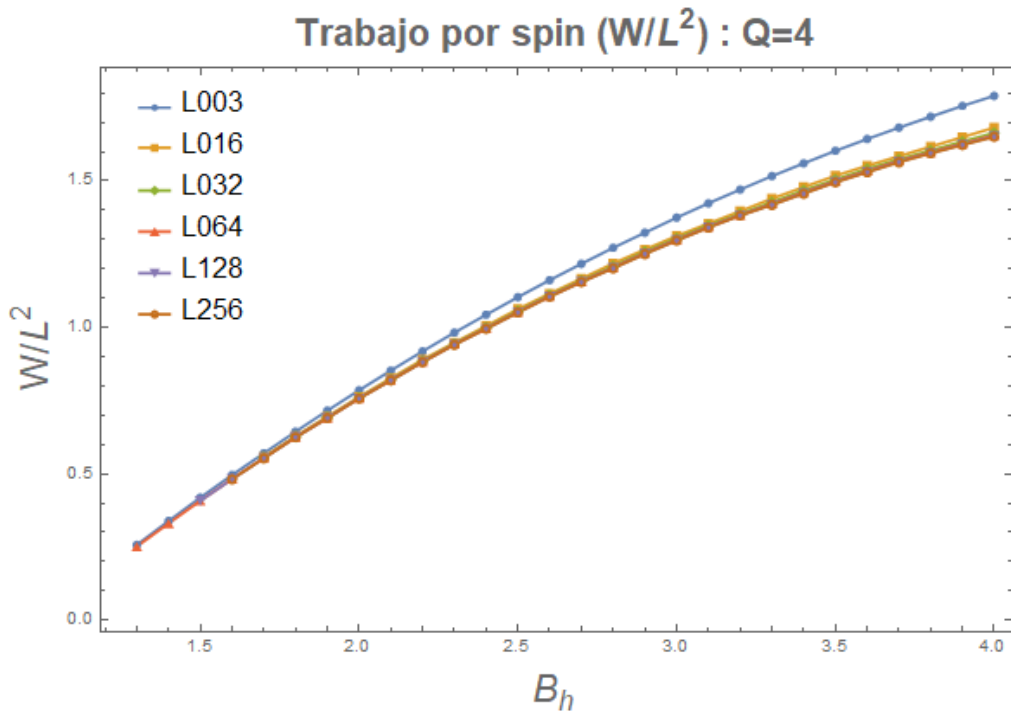
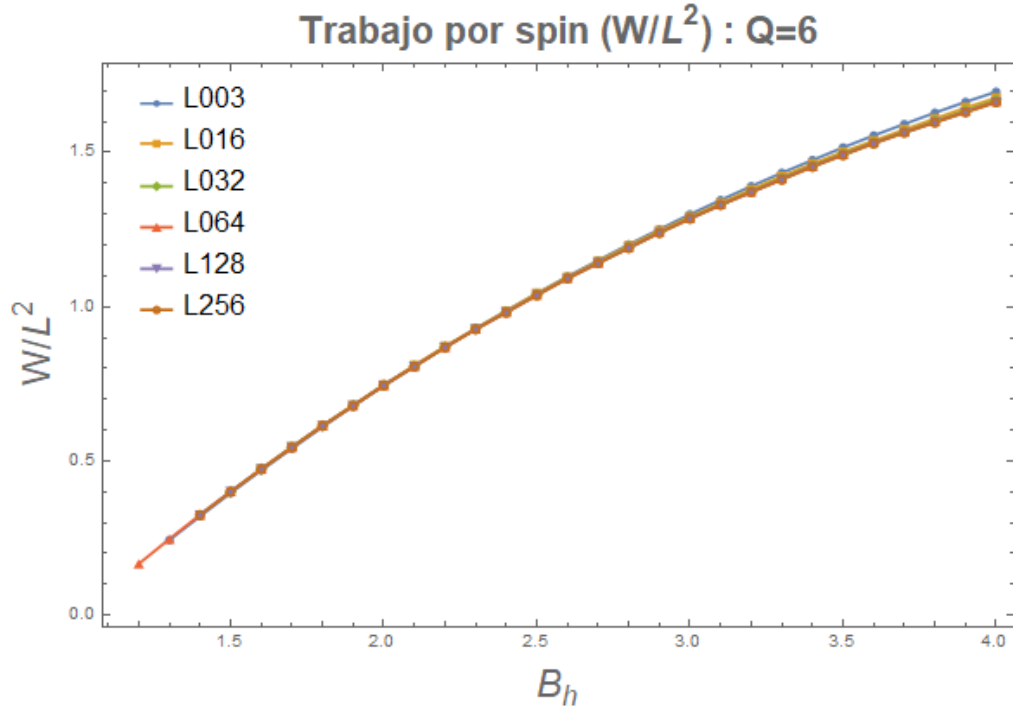
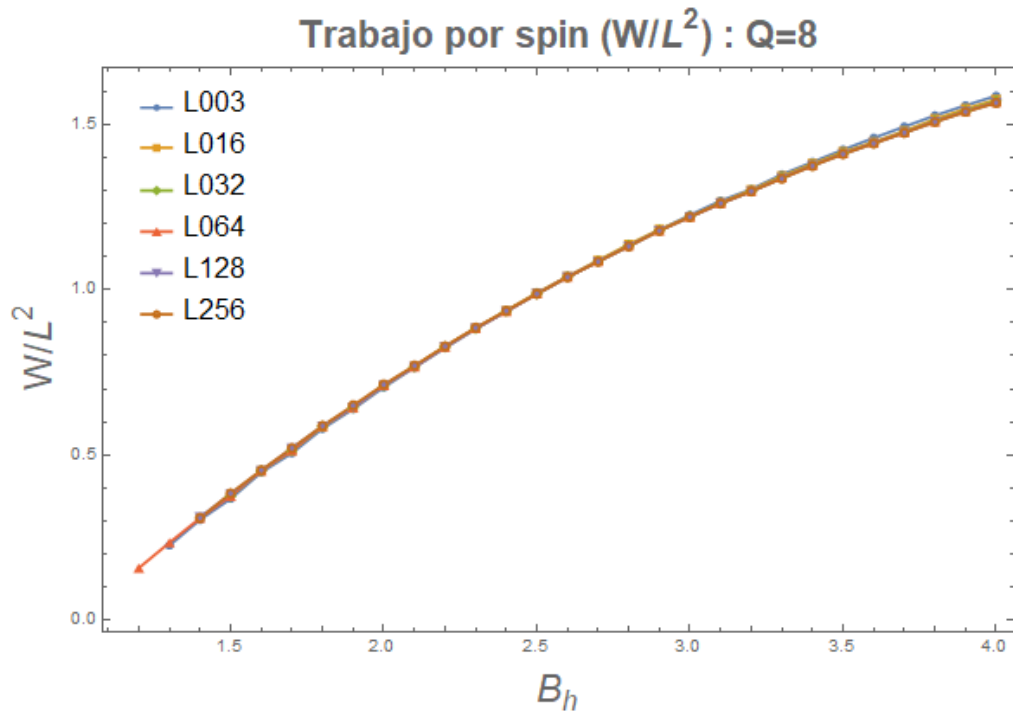
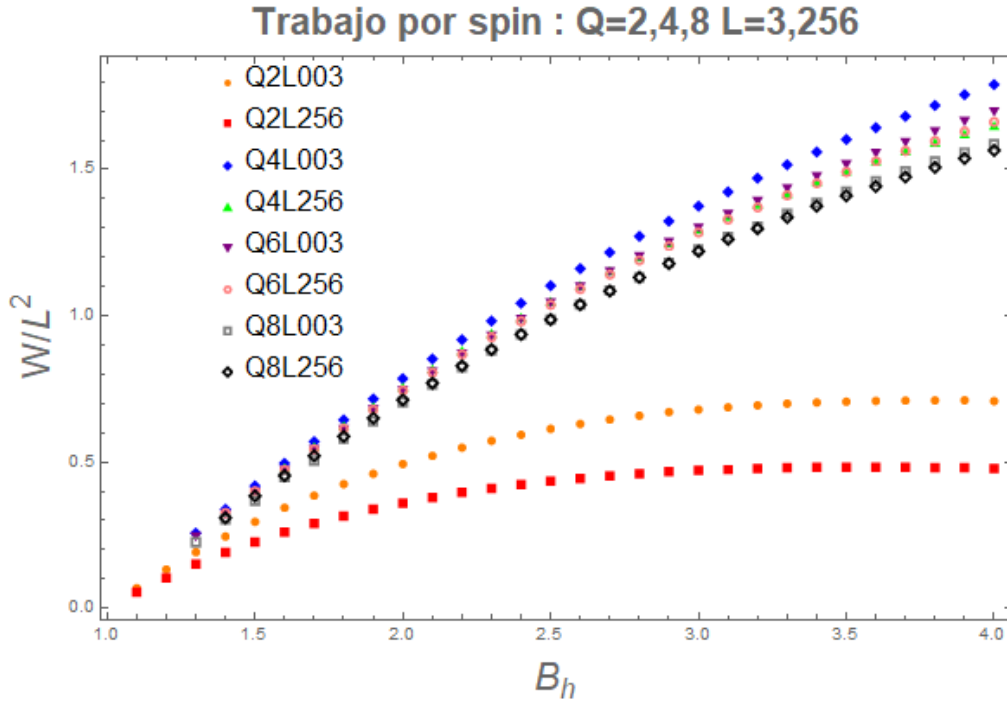


Figura 8.6: $L = 256$ para $q = 2, 4, 6, 8$.

(a) Trabajo por spin $q = 2$.(b) Trabajo por spin $q = 4$.Figura 8.7: Trabajo por spin $q = 2, 4$.

(a) Trabajo por spin $q = 6$.(b) Trabajo por spin $q = 8$.Figura 8.8: Trabajo por spin $q = 6, 8$.

(a) Trabajo por spin $L = 3, 256$ y $q = 2, 4, 6, 8$.



(b) Eficiencia $L = 3, 256$ y $q = 2, 4, 6, 8$.

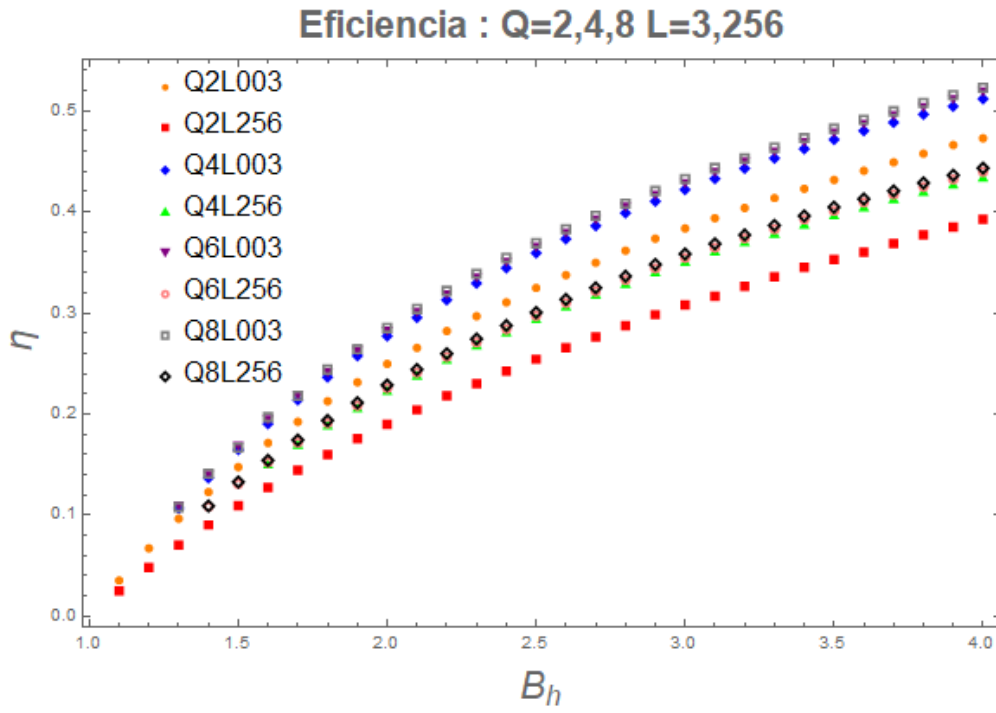
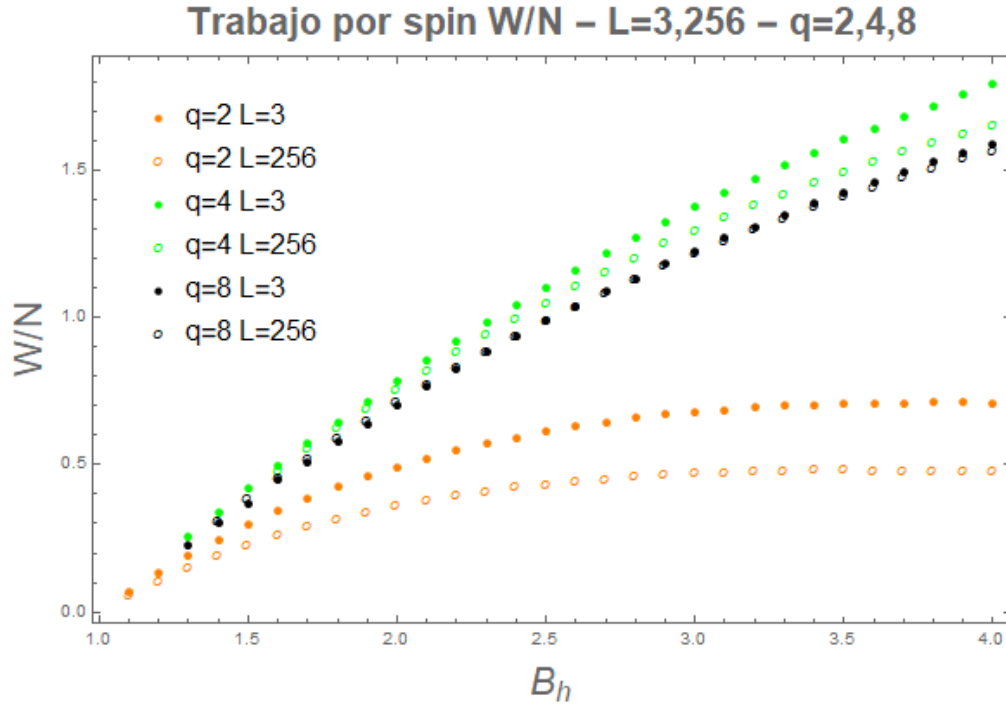


Figura 8.9: $L = 3, 256$ y $q = 2, 4, 6, 8$.

(a) Trabajo por spin $L = 3, 256$ y $q = 2, 4, 8$.



(b) Eficiencia $L = 3, 256$ y $q = 2, 4, 8$.

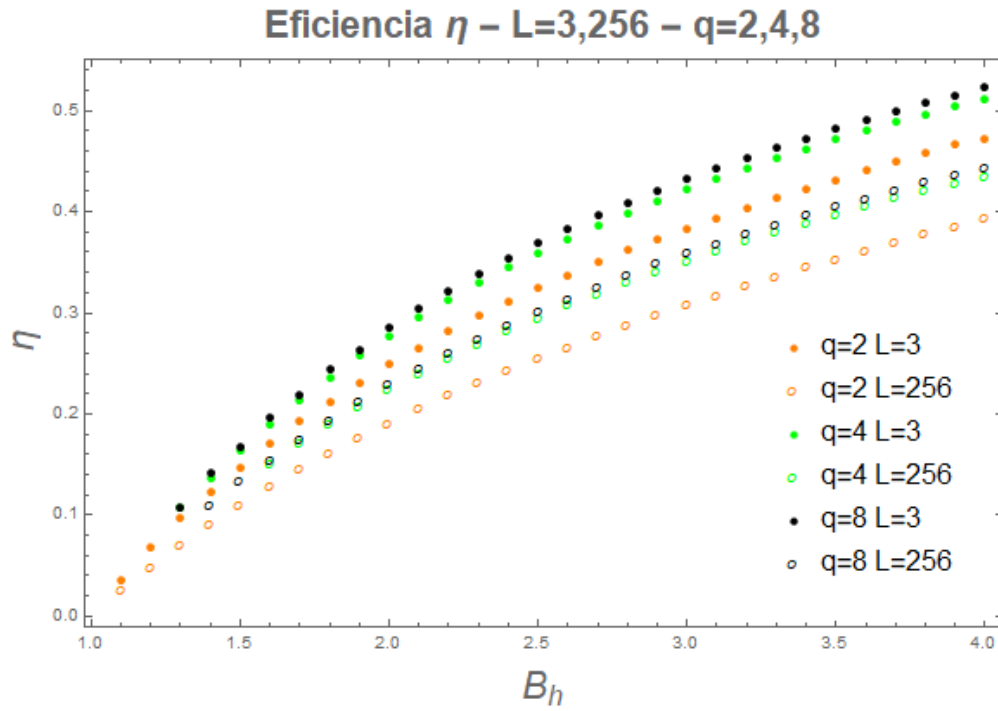


Figura 8.10: $L = 3, 256$ y $q = 2, 4, 8$.

8.4. Videos: Ciclos

Figura 8.11: Este anexo se condiciona al uso de youtube. Se presentan accesos QR según descripción.

(a) Video modelo de Ising. Muestra los distintos ciclos, trabajo obtenido y una mirada a las fases de forma integra.



(b) Video modelo $q = 4$. Muestra los distintos ciclos, trabajo obtenido y una mirada a las fases de forma integra.

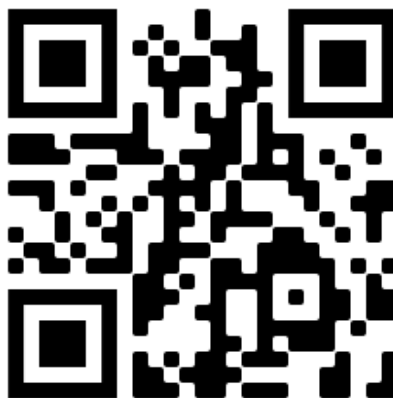
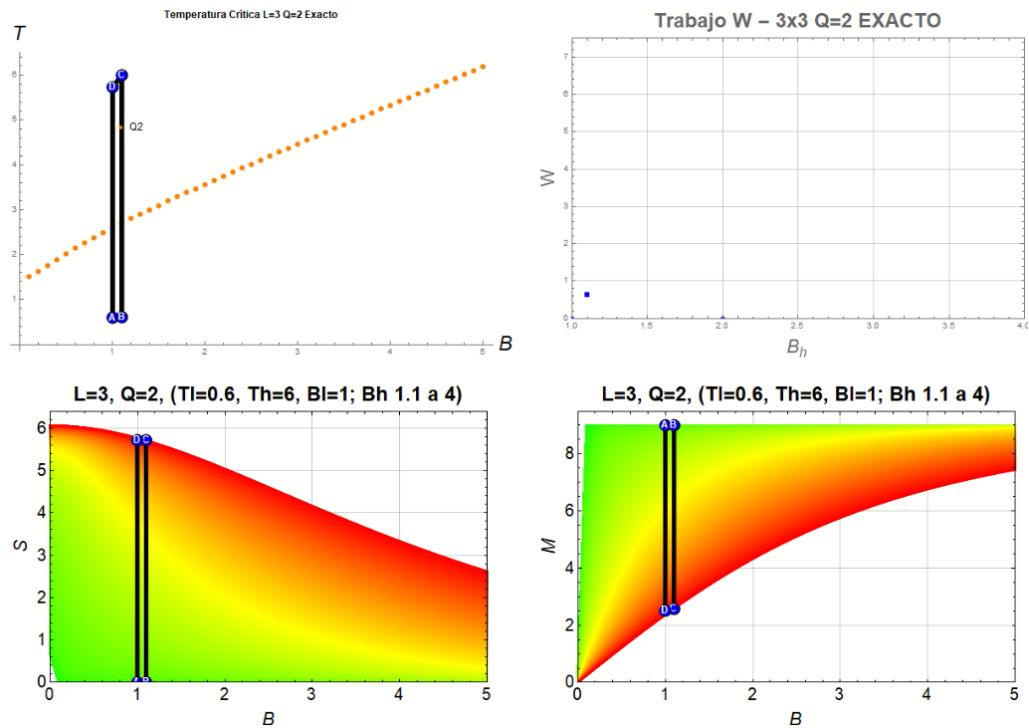


Figura 8.12: <https://youtu.be/WugvKNowJPY>

(a) Captura tiempo 0:00:00.



(b) Captura tiempo 0:00:02.

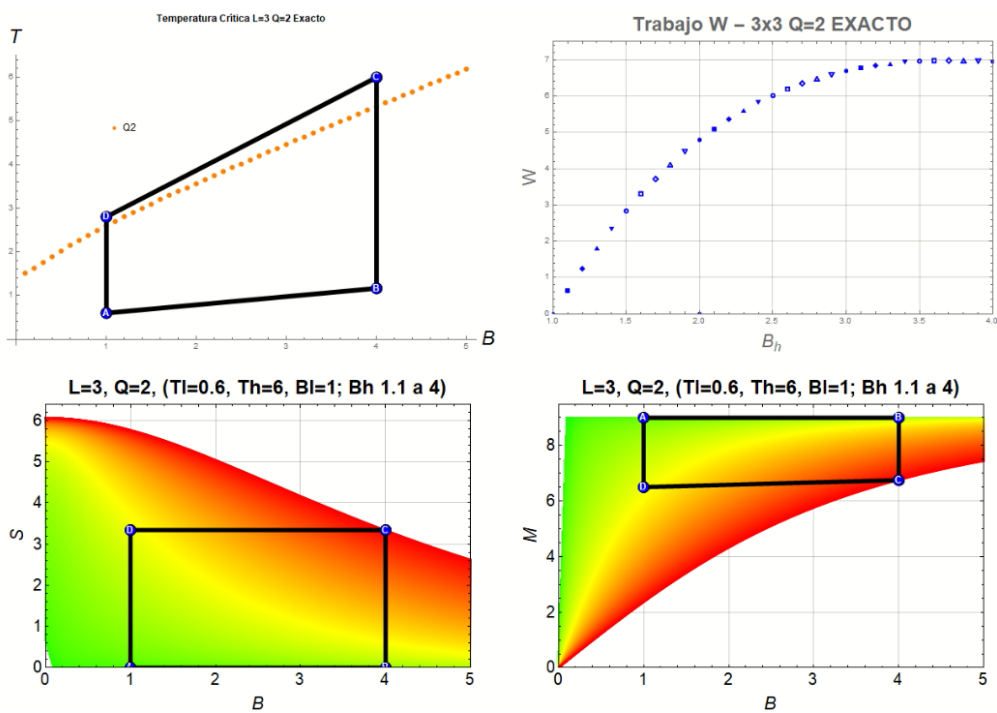
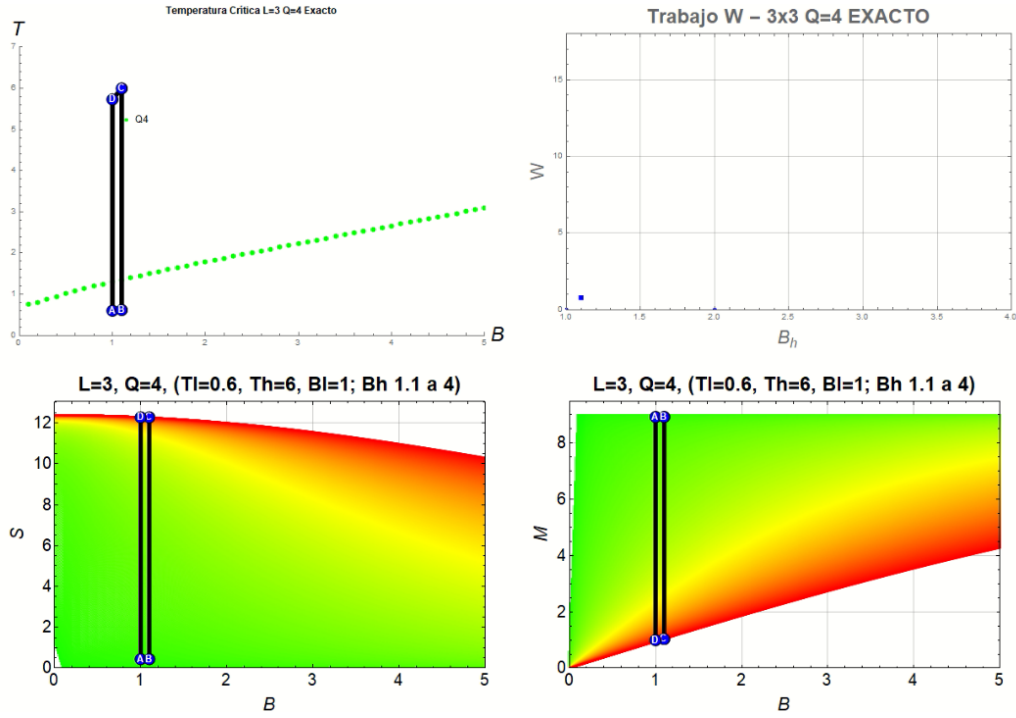
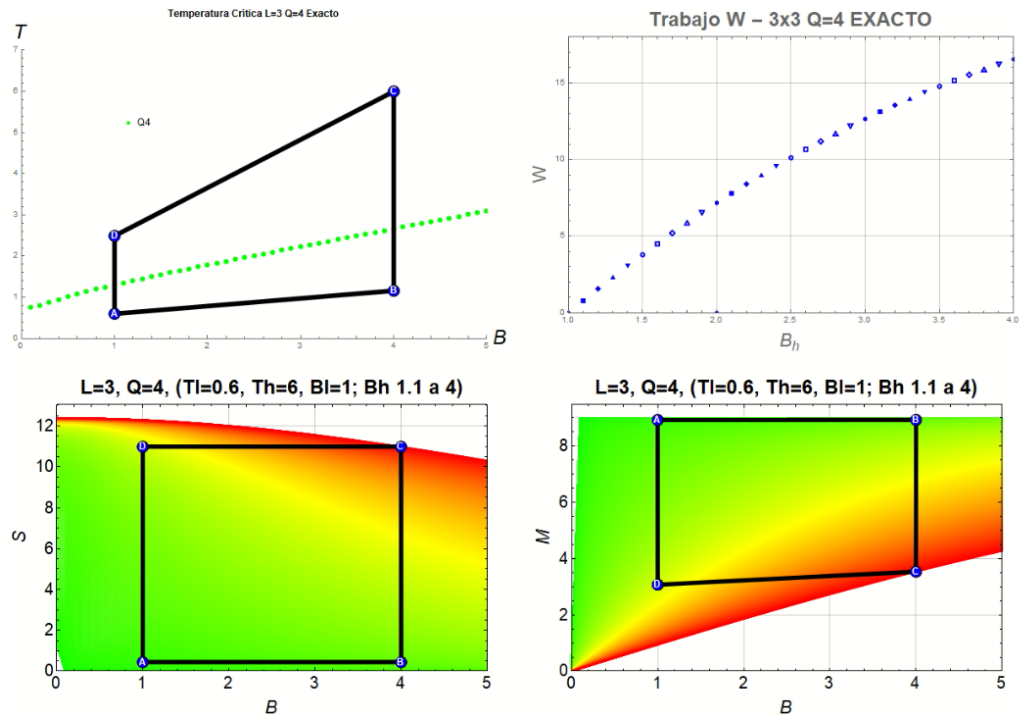


Figura 8.13: <https://youtu.be/sykgvCqPEkY>

(a) Captura tiempo 0:00:00.



(b) Captura tiempo 0:00:02.



Capítulo 9

Bibliografía

Bibliografía

- [1] Weiss, Pierre. "L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique." *J. Phys. Theor. Appl.* 6.1 , 661-690, **1907**
- [2] Ising, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z. Physik* **31**, 253–258, **1925**.
- [3] Onsager L., Crystal statistics I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, *Phys. Rev.* **65**, 117, **1944**
- [4] Berezinskii, V.L. Destruction of Long-range Order in One-dimensional and Two-dimensional Systems having a Continuous Symmetry Group I. Classical Systems. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **1971**, 59, 907–920.
- [5] Kosterlitz, J.M.; Thouless, D.J. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. (Application of dislocation theory). *J. Phys. C Solid State Phys.* **1972**, 5, L124.
- [6] Kosterlitz, J.M.; Thouless, D.J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C Solid State Phys.* **1973**, 6, 1181–1203.
- [7] J M Kosterlitz and D J Thouless - Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **1973**, 6, 7.
- [8] Kosterlitz, J.M. The critical properties of the two-dimensional xy model. *J. Phys. C Solid State Phys.* **1974**, 7, 1046–1060.
- [9] Jose, J.V.; Kadanoff, L.P.; Kirkpatrick, S.; Nelson, D.R. Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model. *Phys. Rev. B* **1977**, 16, 1217–1241.
- [10] Elitzur, S.; Pearson, R.B.; Shigemitsu, J. Phase structure of discrete Abelian spin and gauge systems. *Phys. Rev. D* **1979**, 19, 3698–3714.

- [11] Cardy, J.L. General discrete planar models in two dimensions: Duality properties and phase diagrams. *J. Phys. A Math. Gen.* **1980**, *13*, 1507–1515.
- [12] Fröhlich, J.; Spencer, T. The Kosterlitz-Thouless transition in two-dimensional Abelian spin systems and the Coulomb gas. *Commun. Math. Phys.* **1981**, *81*, 527–602.
- [13] Binder, K. Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions. *Z. Phys. B* **1981**, *119*, 119–140.
- [14] Tobochnik, Jan - Properties of the q -state clock model for $q = 4, 5$, and 6 . *Phys. Rev. B* **1982** *26*, 11.
- [15] Cardy, J. L.; Ostlund, S, Random symmetry-breaking fields and the XY model. *Phys. Rev. B* **1982**, *25*, 6899.
- [16] Challa, Murty S. S. and Landau, D. P. - Critical behavior of the six-state clock model in two dimensions. *Phys. Rev. B* **1986** *33*, 1.
- [17] Nobre, F. D.; Sherrington, D. The infinite-range clock spin glass model: an investigation of the relevance of reflection symmetry. *J. Phys. C Solid State Phys.* **1986**, *19*, L181.
- [18] Scholten, P. D. and Irakliotis, L. J., Li-Ping and Xie, Z. Y. and Tu, Hong-Hao and Liao, Hai-Jun and Xiang, T. - Critical behavior of the q -state clock model in three dimensions. *Physical Review B* **1993** *48*, 2.
- [19] Doussal, P.L.; Giamarchi, T. Replica Symmetry Breaking Instability in the 2D XY Model in a Random Field. *Phys. Rev. Lett.* **1995**, *74*, 606.
- [20] Binder, K. Applications of Monte Carlo methods to statistical physics. *Rep. Prog. Phys.* **1997**, *60*, 487–559.
- [21] Landau, L.D.; Lifshitz, E.M.; Pitaevskii, E.M. *Statistical Physics*; Butterworth-Heinemann: New York, NY, USA, 1999.
- [22] Gouvea, M and Mertens, Franz and Bishop, Ar and Wysin, Gary - The classical two-dimensional XY model with in-plane magnetic field. *Journal of Physics: Condensed Matter* **1999**, *2*
- [23] Landau, David P. and Binder, Kurt - A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics *Z. Cambridge University Press* **2005**.

- [24] Zucca, C. and Tavella, P. - The clock model and its relationship with the Allan and related variances. *Phys. Rev. B* **2005** 52, 2.
- [25] Yanlin Ge, Lingen Chen, Fengrui Sun, Chih Wub - Thermodynamic simulation of performance of an Otto cycle with heat transfer and variable specific heats of working fluid. *International Journal of Thermal Sciences* **2005**, 44, 5.
- [26] Kenna, R. The XY Model and the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Phase Transition. *arXiv* **2005**, arXiv:cond-mat/0512356.
- [27] Quan, H. T. and Liu, Yu-xi and Sun, C. P. and Nori, Franco - Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. *Phys. Rev. E*, **2007**, 76, 3
- [28] Jacques Kotze - - Introduction to Monte Carlo methods for an Ising Model of a Ferromagnet. **2008**
- [29] Per Soderlind* and Kevin T. Moore - When magnetism can stabilize the crystal structure of metals. *ELSEVIER*, **2008**
- [30] Andrew Zangwill - Modern Electromagnetism *Georgia Institute of Technology* **2009**.
- [31] Baek, S.K.; Minnhagen, P.; Kim, B.J. True and quasi-long-range order in the generalized q -state clock model *Phys. Rev. E* **2009**, 80, 060101R.
- [32] Schmitz-Antoniak, Carolin and Lindner, J. and Fauth, Kai and Thiele, Jan-Ulrich and Minar, Jan and Mankovsky, Sergiy and Ebert, H. and Wende, Heiko and Farle, Michael - Composition dependence of exchange stiffness in FePt1-x alloys. *Physical Review B* **2010**, 82
- [33] Thomas, George and Johal, Ramandeep S. - Coupled quantum Otto cycle. *Phys. Rev. E*, **2011**, 83, 3.
- [34] Borisenko, O.; Cortese, G.; Fiore, R.; Gravina, M.; Papa, A. Numerical study of the phase transitions in the two-dimensional $Z(5)$ vector model. *Phys. Rev. E* **2011**, 83, 041120.
- [35] G. Ortiz and E. Cobanera and Z. Nussinov - Dualities and the phase diagram of the p-clock model. *Nuclear Physics B* **2012** 854, 3.
- [36] Ortiz, G.; Cobanera, E.; Nussinov, Z. Dualities and the phase diagram of the p-clock model. *Nucl. Phys. B* **2012**, 854, 780–814.

- [37] Hao Wang and Guoxing Wu and Daojiong Chen - Thermal entangled quantum Otto engine based on the two qubits Heisenberg model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction in an external magnetic field. *Physica Scripta*, **2012**, 86, 1
- [38] Kiss, Janos Chadov, Stanislav Fecher, Gerhard Felser, Claudia. Disorder-induced cubic phase in Fe₂-based Heusler alloys. *Physical Review B*. 87. 10.1103/PhysRevB.87.224403. **2013**
- [39] Ilker, E.; Berker, A. N. High q -state clock spin glasses in three dimensions and the Lyapunov exponents of chaotic phases and chaotic phase boundaries. *Phys. Rev. E* **2013**, 87, 032124.
- [40] Kumano, Y.; Hukushima, K.; Tomita, Y.; Oshikawa, M. Response to a twist in systems with Z_p symmetry: The two-dimensional p -state clock model. *Phys. Rev. B* **2013**, 88, 104427.
- [41] Jose, J.V. *40 Years of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Theory*; World Scientific: London, UK, 2013.
- [42] Ilker, E.; Berker, A. N. Odd q -state clock spin-glass models in three dimensions, asymmetric phase diagrams, and multiple algebraically ordered phases. *Phys. Rev. E* **2014**, 90, 062112.
- [43] M Azimi and L Chotorlishvili and S K Mishra and T Vekua and W Hübner and J Berakdar - Quantum Otto heat engine based on a multiferroic chain working substance. *New Journal of Physics*, **2014**, 16, 6
- [44] Muñoz, Enrique and Peña, Francisco J. and González, Alejandro - Magnetically-Driven Quantum Heat Engines: The Quasi-Static Limit of Their Efficiency. *entropy*, **2016**, 18, 5
- [45] Chotorlishvili, L. and Azimi, M. and Stagraczy S. and Toklikishvili, Z. and Schüler, M. and Berakdar, J. - Superadiabatic quantum heat engine with a multiferroic working medium. *Phys. Rev. E*, **2016**, 94, 3
- [46] Jing Chen and Hai-Jun Liao and Hai-Dong Xie and Xing-Jie Han and Rui-Zhen Huang and Song Cheng and Zhong-Chao Wei and Zhi-Yuan Xie and Tao Xiang - Phase Transition of the q -State Clock Model: Duality and Tensor Renormalization. *Chinese Physics Letters* **2017** 34, 5.

- [47] Kim, D.H. Partition function zeros of the p -state clock model in the complex temperature plane. *Phys. Rev. E* **2017**, *96*, 052130.
- [48] Kosloff, Ronnie and Rezek, Yair - The Quantum Harmonic Otto Cycle. *Entropy*, **2017**, *19*, 4
- [49] Peña, Francisco J. and González, Alejandro and Nunez, Alvaro S. and Orellana, Pedro A. and Rojas, René G. and Vargas, Patricio - Magnetic Engine for the Single-Particle Landau Problem. *Entropy*, **2017**, *19*, 12
- [50] Lupo, C.; Ricci-Tersenghi, F. Approximating the XY model on a random graph with a q -state clock model. *Phys. Rev. B* **2017** *95*, 054433.
- [51] Negrete, O.A.; Vargas, P.; Peña, F.J.; Saravia, G.; Vogel, E.E. Entropy and Mutability for the q -state Clock Model in Small Systems. *Entropy* **2018** *20*, 933.
- [52] Chatterjee, S.; Puri, S.; Paul, R. Ordering kinetics in the q -state clock model: Scaling properties and growth laws. *Phys. Rev. E* **2018**, *98*, 032109
- [53] Peña, Francisco J. and Negrete, Oscar and Alvarado, Gabriel and Zambrano, David and González, A. and Núñez, Alvaro and Orellana, P. and vargas, patricio - Magnetic Otto Engine for an Electron in a Quantum Dot: Classical and Quantum Approach. *entropy*, **2019**, *21*
- [54] Peña, Francisco J. and Zambrano, David and Negrete, Oscar and De Chiara, Gabriele and Orellana, P. and vargas, patricio - Quantum and classical Otto engine for a 2-D material: the case of a graphene quantum dot. *entropy*, **2019**
- [55] Hasenbusch, Martin - Monte Carlo study of an improved clock model in three dimensions. *Phys. Rev. B*, **2019**, *100*, 22
- [56] Li, Zi-Qian and Yang, Li-Ping and Xie, Z. Y. and Tu, Hong-Hao and Liao, Hai-Jun and Xiang, T. - Critical properties of the two-dimensional q -state clock model. *Physical Review E* **2020** *101*, 6.
- [57] Peña, Francisco J. and Zambrano, D. and Negrete, O. and De Chiara, Gabriele and Orellana, P. A. and Vargas, P. - Quasistatic and quantum-adiabatic Otto engine for a two-dimensional material: The case of a graphene quantum dot. *Physical Review E*, **2020**, *101*, 1
- [58] Francisco J. Peña and Oscar Negrete and Natalia Cortés and Patricio Vargas - Otto Engine Classical and Quantum. *entropy*, **2020**, *22*, 755

- [59] Peña, Francisco J. and Zambrano, D. and Negrete, O. and De Chiara, Gabriele and Orellana, P. A. and Vargas, P. - Quasistatic and quantum-adiabatic Otto engine for a two-dimensional material: The case of a graphene quantum dot. *Phys. Rev. E*, **2020**, *101*, 1
- [60] Oscar A. Negrete and Patricio Vargas and Francisco J. Peña and Gonzalo Saravia and Eugenio E. Vogel - Short-Range Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Phase Characterization for the q-State Clock Model. *Entropy* **2021**, *23*.