UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

Aplicaciones de Nanotecnología Computacional

Proyecto 6: *Modelo de Ising*

Diego Armando Alvarado Silos, 1941598
José Abraham Morales Vidales, 1941505
René Rogelio Corrales Millán, 1941487

Profesor: Dr. Omar González Amezcua

28 de abril de 2021

Resumen

Mediante la utilización de un algoritmo de cómputo se implementó el modelo de Ising para caracterizar un sistema de spines. Se analizaron los valores medios de la magnetización y la energía respecto a un factor de energía; finalmente se exportó una animación del modelo de Ising a través del tiempo.

Palabras clave: *Modelo de Ising, magnetización.*

Introducción

Los problemas de física estadística en los que se estudian partículas altamente interactuantes son, por lo general, matemáticamente complejos. El objetivo general del estudio estadístico de fenómenos físicos es desarrollar modelos que puedan expresar la naturaleza lo más sencillo posible.[1] El primer modelo que consiguió este objetivo es el modelo de Ising. Lo que hace especial a este modelo es que tiene solución analítica, que lo hace bastante útil para realizar nuevas aproximaciones y compararlas con la solución real.

El modelo de Ising es un modelo de la física estadística utilizado para estudiar cambios de fase, que ocurren cuando un pequeño cambio en algún parámetro provoca un cambio cualitativo en el sistema a gran escala. El modelo de Ising puede se puede aplicar en termodinámica, electromagnetismo, en química, biología molecular, o en cualquier sistema a gran escala que presente un comportamiento cooperativo.[2] Sin embargo, originalmente se desarrolló por Ernest Ising para estudiar el ferromagnetismo, precisamente la magnetización espontánea, y este es el objeto de estudio de este proyecto.

Marco teórico

En un sistema de *N* partículas, donde cada partícula tiene 3 grados de libertad, la probabilidad de cada estado del sistema es proporcional al factor de Boltzmann.

$$P \propto e^{-\beta H(q,p)} \qquad (1)$$

Donde $q = \{q_1, q_2, \dots, q_{3N}\}$, $p = \{p_1, p_2, \dots, p_{3N}\}$ y $\beta = 1/kT$.

En este trabajo se estudiarán las interacciones entre partículas con espín $\pm 1/2$ utilizando el modelo de Ising en dos dimensiones. Este es formulado en una cuadrícula donde en cada nodo se encuentra una partícula que interactúa con sus 4 vecinos más cercanos.

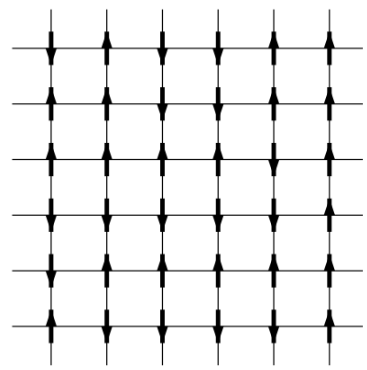

Figura 1. Ejemplo de una configuración de un sistema con partículas de espín ½.

El Hamiltoniano de este sistema está dado de la siguiente forma:

$$H(s_i) = -J \sum_{nn} s_i s_j - B \sum_i s_i \qquad (2)$$

La variable $s_i = \pm 1$ indica cuando el espín está apuntando hacia arriba o abajo. J es una constante ferromagnética positiva y B es un campo magnético externo, que en este caso se va a considerar nulo. Con este modelo se desea estudiar la transición de fase desde un estado ordenado con una magnetización $m \neq 0$ para una temperatura $T < T_c$, a una fase desordenada donde $m = 0$ para $T > T_c$.

El objetivo es determinar el promedio de la energía y magnetización para cada configuración *s* de las *N* partículas, esto se puede realizar analíticamente utilizando la siguiente fórmula, donde $A(s)$ es la energía o magnetización.

$$\langle A \rangle = \sum_s A(s)P(s) = \frac{\sum_s A(s)e^{-\beta H(s)}}{\sum_s e^{-\beta H(s)}} \quad (3)$$

El número de configuraciones posibles es de 2^N, lo que quiere decir que es prácticamente imposible realizar la suma total; por lo tanto, debemos seleccionar un conjunto reducido de configuraciones de manera aleatoria. Entonces podemos expresar la ecuación (3) de la siguiente forma:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_s A_s \quad (4)$$

Donde M es el número de configuraciones seleccionados. Si estás configuraciones se seleccionan de manera aleatoria uniforme encontraremos que la mayoría tienen probabilidades despreciables; por lo tanto, se deben seleccionar de manera no uniforme utilizando el método de Metrópoli.

Objetivo general

Computar el promedio de la energía y magnetización para las configuraciones de un sistema de N partículas de espín $1/2$, replicando los resultados del artículo de referencia. Computar el promedio de la energía y magnetización para las configuraciones de un sistema de N partículas de espín $1/2$, replicando los resultados del artículo de referencia.

Objetivo específico

1. Replicar los resultados de la energía y la magnetización para un sistema de spines.

2. Hacer una animación del sistema con el paso del tiempo (pasos de MC).

Resultados

En la Fig. 1 se muestra cómo está representado un sistema bidimensional de spines; la comodidad de este modelo radica en su forma, de manera que puede ser representado a través de un arreglo (matriz) como se sugiere a continuación:

$$\mathbf{is}_{m\times n} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1n} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = [s_{ij}]_{m\times n}$$

donde $s_{ij} \in \{-1, 1\}$.

En resumen, el algoritmo principal del modelo de Ising se puede entender de la siguiente forma:

```
E = - sij * (si+1,j + si-1,j + si,j+1 + si,j-1)
if E < 0 then:
    sij = - sij
else:
    if rand() < exp(-2EJ/kT) then:
        sij = - sij
```

Con esto, se da pie a una serie de análisis interesantes. Primeramente, se propone ver cómo se comportan las cantidades $\langle M \rangle$ y $\langle E \rangle$ a distintos valores de kT/J. Seguidamente, a modo de terminar de entender el modelo de *Ising*, se desea realizar una animación del estado del modelo de spines a través del tiempo.

1. Distribución de los valores medios de la *magnetización* y la *energía*

Se puede establecer un sistema de n spines y N pasos de Monte Carlo, y analizar cómo se comportan los valores de medios de la magnetización y la energía para distintos valores de kT/J. Los resultados obtenidos para $n = 20$, $N = 10e8$ y kT/J entre 0 y 3.5 son los siguientes:

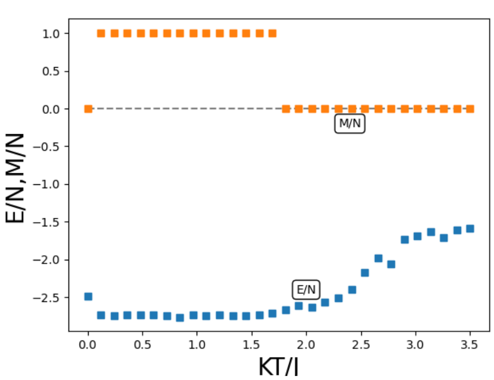

Figura 2. Diagrama de fase (M/N vs. T) y la dependencia de la energía por spin (E/N vs. T).

El código utilizado para generar este gráfico consta de dos partes, la primera y la más importante es una subrutina de Fortran encargada de realizar los cálculos sobre el estado de los spines y la segunda, un programa de Python encargado de recabar los datos y graficarlos con PyPlot.

Mayores cantidades de pasos y de spines involucran tiempos de cálculo mucho más prolongados sin embargo los valores establecidos para n y N fueron los suficientes para obtener datos confiables.

2. Evolución de un modelo de spines

Poniendo en función el algoritmo presentado en la sección 1 y graficando la matriz de spines después de una cierta cantidad de iteraciones se obtienen las siguientes figuras:

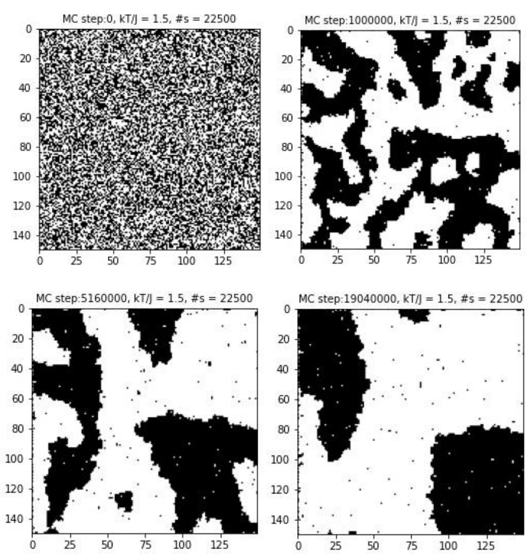

Figura 3. Evolución de un sistema de 125×125 spines con $kT/J = 1.5$ a 0, 1, 5 y 19 millones de pasos de Monte Carlo.

Estas figuras fueron obtenidas a partir de un código de Python, cuyo ciclo principal es el que se muestra en la figura 4.

Para ver la animación completa puede consultar el archivo **`ising.avi`** de 336 frames de la evolución del sistema de spines.

```
for k in range (n_steps):

    i = rd.randint(1, n-1)
    j = rd.randint(1, n-1)

    if (i == 0):
        if (j == 0):
            E = -s[i,j] * (s[i+1,j] + s[i,j+1])
        else:
            E = -s[i,j] * (s[i+1,j] + s[i,j+1] + s[i,j-1])
    elif (i == n-1):
        if (j == n-1):
            E = -s[i,j] * (s[i-1,j] + s[i,j-1])
        else:
            E = -s[i,j] * (s[i-1,j] + s[i,j+1] + s[i,j-1])

    elif (j == 0):
        E = -s[i,j] * (s[i+1,j] + s[i,j+1] + s[i-1,j])
    elif (j == n-1):
        E = -s[i,j] * (s[i+1,j] + s[i-1,j] + s[i,j-1])

    else:
        E = -s[i,j] * (s[i+1,j] + s[i-1,j] + s[i,j+1] + s[i,j-1])

    if (E > 0):
        s[i,j] = -s[i,j]
    else:
        r = rd.random()
        if (r < np.exp(2*E/T)):
            s[i,j] = -s[i,j]

    if (k % n_block == 0):

        plt.imshow(s, cmap="gist_gray")
        plt.title("MC step:"+str(k)+", kT/J ="+str(T)+", #s = "+st
        plt.savefig(directory + '/' + file_name.format(l))
        l = l + 1
```

Figura 4. Código para generar animación de la evolución de un modelo de spines.

Conclusiones

Se calcularon satisfactoriamente los niveles de energía y magnetización promedio para diferentes temperaturas, sin embargo, los cálculos que se deben realizar para generar la gráfica de la figura 2 tienen costos computacionales muy altos para números de iteraciones grandes por lo que el tiempo de cálculo se extendió más allá de lo previsto. El comportamiento grafico de nuestros datos coincide en gran medida con la gráfica que se esperaría generar.

La animación sobre la evolución del modelo de spines fue muy importante para entender no solo lo que pasaba en nuestro sistema sino también la esencia del modelo de Ising y de los modelos estadísticos en general y sus aplicaciones en la física computacional.

Referencias

[1] Glauber, R. Time-dependent statistics of the Ising model. *Journal of Mathematical Physics* 4, 294 (1963).

[2] Cipra, B. An Introduction to the Ising Model. *The American Mathematicaly Monthly* 94, pages: 937-959 (1987).