

UNIVERSIDAD DE GRANADA

FÍSICA COMPUTACIONAL

DOBLE GRADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

Modelo de Ising



AARÓN BENITEZ BARÓN

[HTTPS://GITHUB.COM/AARONBB1999/VOLUNTARIO_ISING](https://github.com/AaronBB1999/Voluntario_Ising)

Índice

1. Fundamento teórico	2
2. Resultados y discusión	3
2.1. Magnetización promedio	3
2.2. Energía media	4
2.3. Calor específico	5
2.4. Función de correlación	7
2.4.1. Longitud de correlación ξ y exponente crítico	7
3. Conclusiones	9

Objetivos

Estudio de diversas magnitudes físicas relacionadas con el Modelo de Ising, como la magnetización y la energía del sistema. Observación de la dependencia de estas con la temperatura y el tamaño del sistema además de su comportamiento en un cambio de fase de segundo orden.

1. Fundamento teórico

El Modelo de Ising consiste en un modelo utilizado en física estadística para estudiar sistemas ferromagnéticos. En este encontramos $N \times N$ partículas colocadas en una cuadrícula a las que se le otorga un valor de espín ± 1 .

El modelo en 2 dimensiones fue resuelto analíticamente por L. Onsager en 1944, sin embargo, en nuestro caso haremos evolucionar el sistema gracias al método probabilístico de Montecarlo, donde en cada unidad de tiempo una partícula tendrá cierta probabilidad de cambiar su espín dependiendo de la temperatura del sistema y de la energía de dicha partícula en ese momento.

Mostramos ahora algunos resultados que nos ofrece la solución analítica y que comparemos con nuestras simulaciones. La **magnetización promedio** viene dada por:

$$m = [1 - (\sinh 2\beta J)^{-4}]^{1/8} \quad T \leq T_c$$
$$m = 0 \quad T \geq T_c$$

En este resultado, T_c hace referencia a la temperatura crítica donde el material sufre una transición de fase de segundo orden, volviéndose a partir de ella ferromagnético. Para calcularla, solamente tenemos que tener en cuenta que el cambio de fase ocurrirá en el momento en que $\sinh 2\beta J = 1$ y teniendo en cuenta las unidades en las que trabajamos $J = 1$, $\beta = 1/T$ y por lo tanto $k_B = 1$, se obtiene que:

$$T_c = 2 * (\ln(1 + \sqrt{2}))^{-1} \approx 2,269$$

Este cambio de fase resulta también en un cambio repentino en la **energía media del sistema** e_N , la cual crece a un valor distinto tras superar T_c . También tenemos una expresión aproximación para el **calor específico** c_N del sistema en torno a la temperatura crítica:

$$c \approx -0,4945 \ln \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| + C$$

Otra magnitud a tener en cuenta en nuestro estudio será la **función de correlación** $f(i)$ entre un espín en cierta posición y otro alejado i posiciones a la derecha. Esta función cumple teóricamente la siguiente relación:

$$f(i) \propto e^{-i/\xi}$$

donde ξ designa la longitud de correlación del sistema, que describe el tamaño típico de las acumulaciones de espines.

Exponentes críticos y teoría de tamaño finito

Los exponentes críticos describen el comportamiento de las funciones termodinámicas en las proximidades de una transición de fase, es decir, alrededor de la temperatura crítica T_c . Por ejemplo, tanto la magnetización como la longitud de correlación de nuestro sistema vendrán descritas por:

$$\xi \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu}$$
$$m_N \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{\beta}$$

donde ν y β son sus respectivos exponente críticos en cada caso. Teóricamente, estos toman los valores:

$$\beta = 0,125 \qquad \nu = 0,25$$

Estas transiciones ocurren en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$), por lo que al trabajar con sistemas finitos aparecen los llamados efectos de tamaño finito. La variación de las propiedades de un sistema respecto a su tamaño se conoce como teoría de tamaño finito. En nuestro caso particular, las divergencias debidas a las transiciones de fase se convertirán en máximos o mínimos. Estos tenderán al comportamiento teórico al aumentar el tamaño del sistema N .

2. Resultados y discusión

Comenzamos exponiendo los resultados obtenidos con el método Montecarlo y comparándolos con los valores teóricos. Las simulaciones comenzaban desde un estado completamente ordenado de espines y se iban tomando medidas cada 100 pMC. Al realizar 10^6 pMC la simulación se acababa y se promediaban las medidas. Se tomaron medidas para 9 temperaturas distintas en el intervalo $[1.5, 3.5]$ y se realizaron mediciones para los siguientes tamaños del sistema $N = 16, 32, 64$ y 128 .

2.1. Magnetización promedio

En primer lugar, se expone el comportamiento de la magnetización promedio en función de la temperatura y para cada uno de los tamaños considerados:

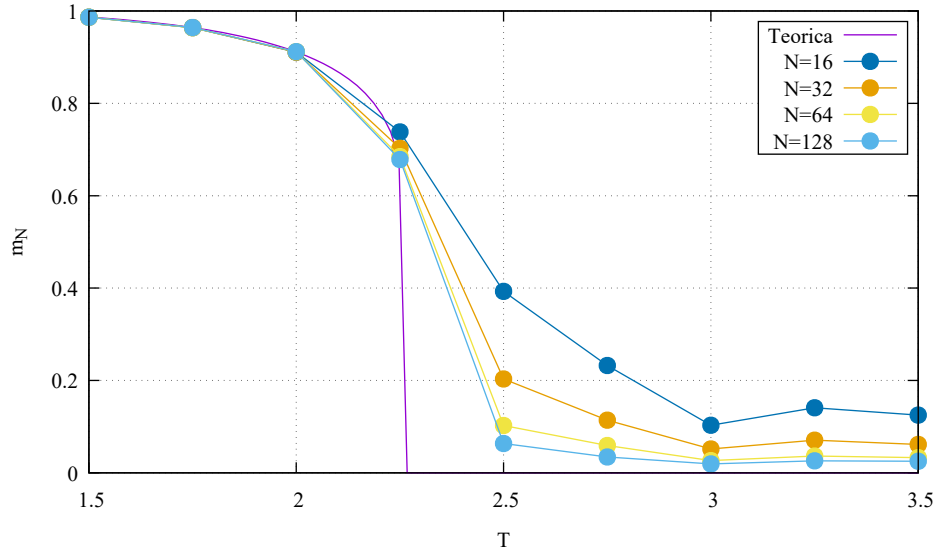


Figura 1: Magnetización promedio en función de la temperatura y del tamaño del sistema

Nos encontramos con una magnetización alta para temperaturas bajas, menores que la temperatura crítica. Una vez superada esta y como preveíamos, el sistema se torna ferromagnético y la magnetización decrece bruscamente hasta valores próximos a cero.

Observamos que para temperaturas menores que T_c los resultados se ajustan perfectamente a los teóricos. Sin embargo, al superar esta temperatura, la caída en la magnetización simulada no es tan repentina como en la función teórica. Conforme se aumenta el tamaño N el comportamiento se asemeja más al teórico, indicando que en límite $N \rightarrow \infty$ tiende a los valores esperados.

2.2. Energía media

Ahora presentamos, de la misma manera, la energía media del sistema frente a los parámetros estudiados

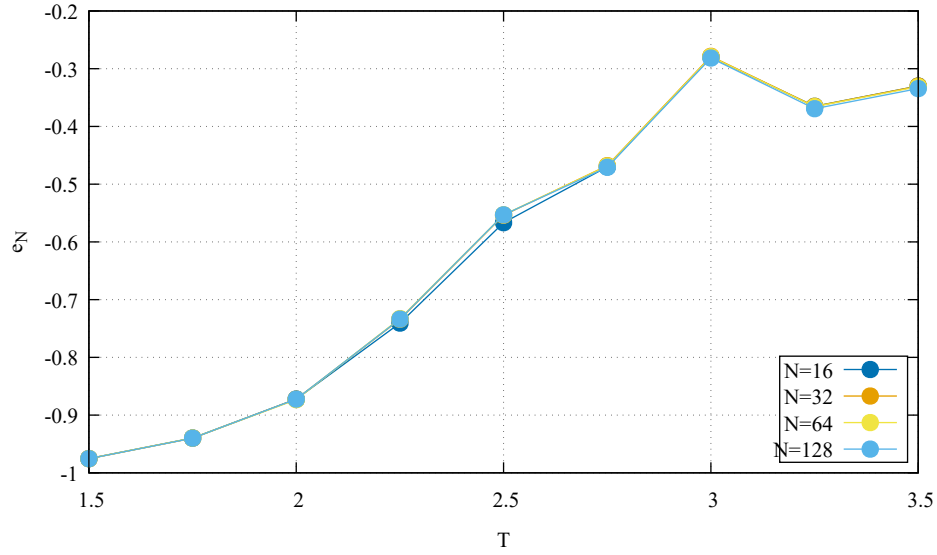


Figura 2: Energía media en función de la temperatura y del tamaño del sistema

Observamos que esta es creciente frente a la temperatura de la simulación, sin embargo, este crecimiento se ve acentuado en la transición de fase. Cabe destacar que parece haber una anomalía para la $T = 3$ para la cuál no se ha encontrado una explicación.

2.3. Calor específico

Repetimos la técnica ejecutada en los anteriores apartados esta vez con el calor específico. Representamos los datos obtenidos con las distintas simulaciones y también el valor teórico esperado:

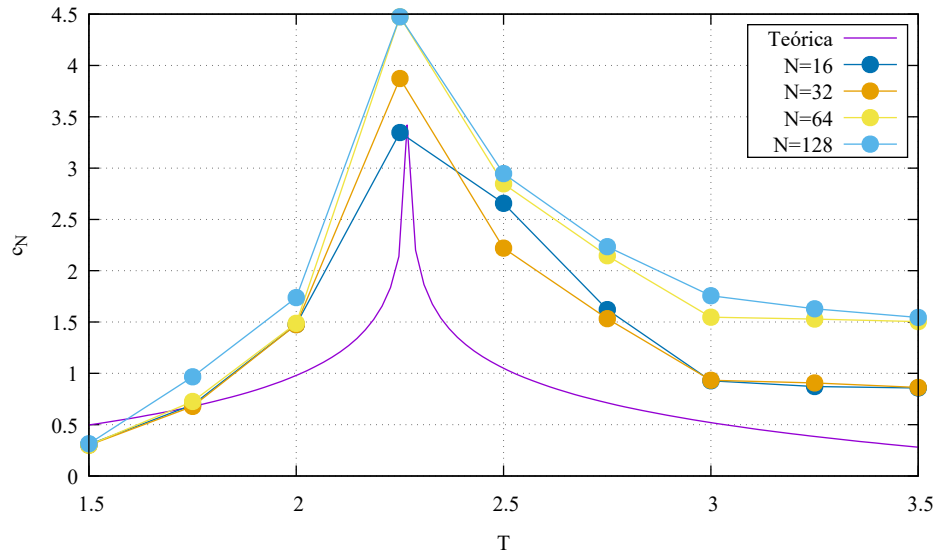


Figura 3: Calor específico en función de la temperatura y del tamaño del sistema

Comprobamos que tanto teórica, como experimentalmente el calor específico crece de manera significativa en torno a la temperatura en la que ocurre el cambio de fase de segundo orden.

Hay que tener en cuenta que el máximo de la curva teórica es realmente una asíntota vertical, es decir, la función diverge en T_c , por lo que cobra sentido que conforme aumentemos el tamaño de la red, los valores del calor específico cercanos a la divergencia aumenten.

Obtención del punto crítico experimentalmente

Procedemos ahora a encontrar mediante sendas simulaciones para cada N , el valor de $T_c(N)$. Para ello, realizamos simulaciones alrededor de donde teóricamente hemos previsto que se encontraría dicho punto y obtenemos un valor aproximado del punto crítico:

Cuadro 1: Método utilizado para obtener los valores de la temperatura crítica para cada tamaño del sistema.

$N=16$		$N=32$		$N=64$		$N=128$	
T	C_V	T	C_V	T	C_V	T	C_V
2.30	3.544616	2.280	4.394186	2.2980	9.869051	2.29840	20.673882
2.31	3.683603	2.285	4.664882	2.2985	9.975883	2.29845	21.935048
2.32	3.610957	2.290	4.582887	2.2990	9.317277	2.29855	20.995009
2.33	3.575439	2.295	4.400692	2.2300	9.060313	2.29860	20.115769
$T_c = 2,31$		$T_c = 2,285$		$T_c = 2,2985$		$T_c = 2,2845$	

Teniendo en cuenta que, como se había descrito antes, $T_c \approx 2,269$ nuestros valores están un poco por encima de este, sin embargo, con apenas solo un 1 % de error relativo, por lo que son resultados fructíferos. La tendencia seguida es que cuanto mayor sea el tamaño de la red, mas se acerca nuestro punto crítico experimental al teórico.

Exponente crítico β de la magnetización

Dada la temperatura crítica calculada para cada N , vamos a calcular el exponente crítico de la magnetización β . Para ello, realizamos un ajuste para los valores de la magnetización menores que la temperatura crítica, de la forma:

$$m_N = a \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^b$$

Este ajuste solo lo podremos llevar a cabo con los datos de la magnetización previos a T_c , los cuales son los únicos que tiene sentido considerar, ya que posteriormente la magnetización se vuelve nula. De esta expresión obtendremos que $b = \beta$. Recogemos por tanto los resultados obtenidos en la siguiente tabla:

Cuadro 2: Calculo del exponente crítico de la magnetización

N	16	32	64	128
β	$0,112 \pm 0,009$	$0,115 \pm 0,015$	$0,0,118 \pm 0,019$	$0,121 \pm 0,019$

Teóricamente, conforme aumentamos N deberíamos acercarnos al valor teórico $\beta = 0,125$. Efectivamente, nuestros resultados parecen aproximarse a dicho valor teórico, llegando a obtener para $N = 128$ un error relativo del 3%.

2.4. Función de correlación

En último lugar, vamos a analizar el comportamiento de la función de correlación. Nos centraremos principalmente en el caso $N=128$. Recordamos que se espera que esta función decrezca exponencialmente, regida por el valor de la longitud de correlación. Vamos a representarla entonces para varias temperaturas:

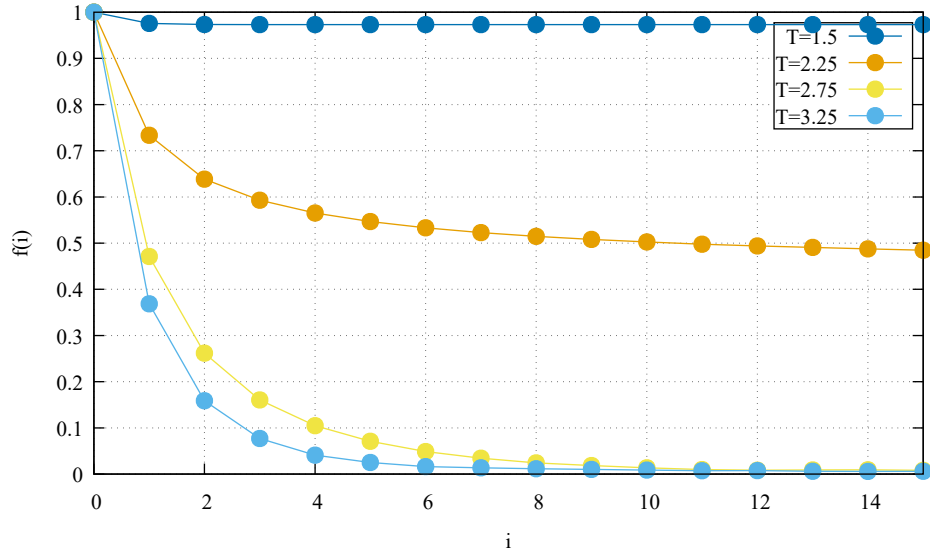


Figura 4: Función de correlación para diferentes temperaturas

Efectivamente, vemos a simple vista el decaimiento exponencial, el cual se acentúa al ir incrementando la temperatura del sistema.

2.4.1. Longitud de correlación ξ y exponente crítico

Realizando un ajuste exponencial para cada temperatura vamos a hallar la longitud de correlación de la red:

$$f(i) = be^{-i/a} + c$$

donde tendremos que $a = \xi$. Tras realizar estos ajustes obtenemos los siguientes resultados:

Cuadro 3: Longitud de correlación de la red con N=128 para cada temperatura estudiada

T	ξ
1.50	0.4227 ± 0.0015
1.75	0.5314 ± 0.0021
2.00	0.730 ± 0.008
2.25	2.02 ± 0.13
2.50	2.25 ± 0.10
2.75	1.49 ± 0.04
3.00	1.230 ± 0.005
3.25	1.033 ± 0.012
3.50	0.926 ± 0.009

Si lo representamos gráficamente:

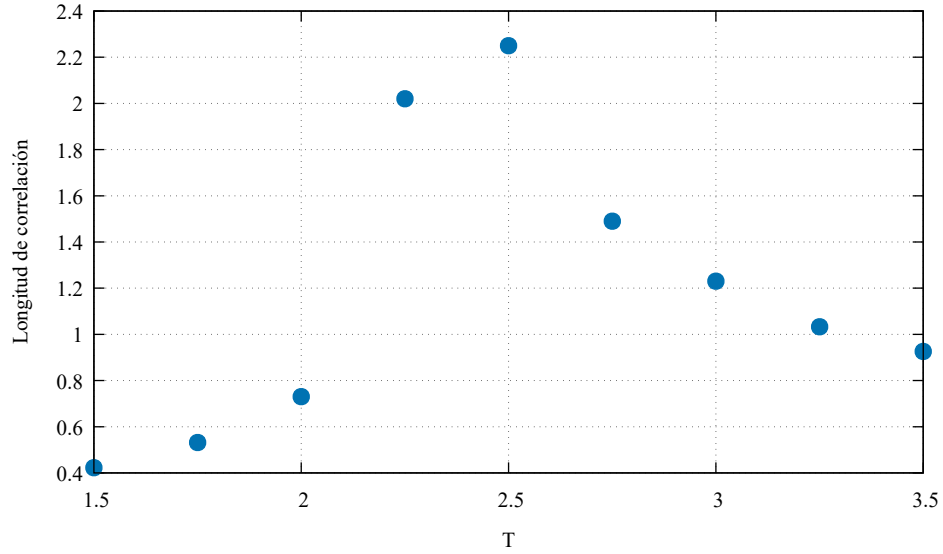


Figura 5: Longitud de correlación en función de la temperatura

Observamos como en torno a T_c aumenta también bruscamente el valor de ξ . Finalmente, calculamos el exponente crítico característico de la longitud de correlación mediante el siguiente ajuste:

$$\xi(T) = a \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^b$$

donde el exponente crítico asociado será $\nu = -b$. Gráficamente obtenemos el siguiente ajuste:

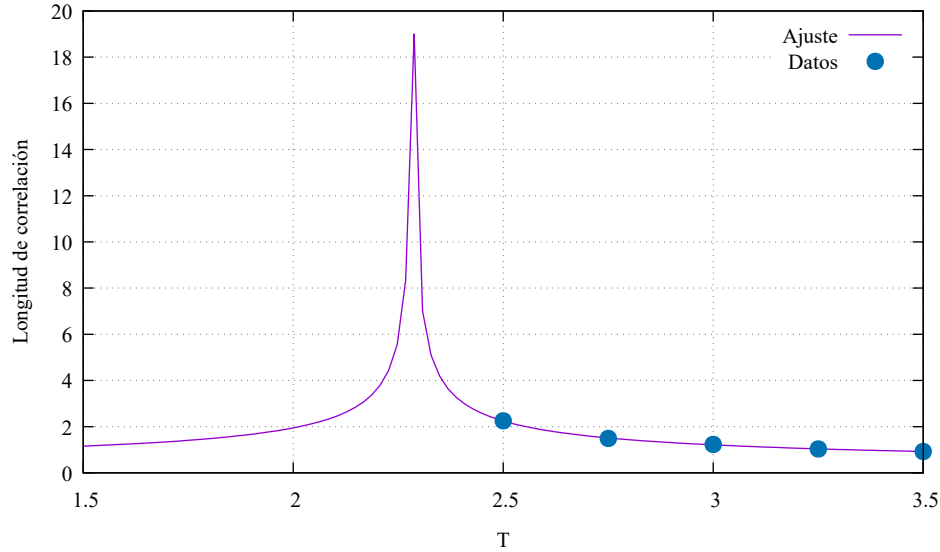


Figura 6: Ajuste para la obtención del exponente crítico de f .

Para dicho ajuste se obtiene finalmente que $\nu = 0,514 \pm 0,08$. Este resultado está bastante alejado del teórico $\nu = 0,25$ lo cual lo podemos achacar a los pocos datos tomados alrededor de la divergencia en el punto crítico.

3. Conclusiones

El método de Montecarlo aplicado al Modelo de Ising ha producido, en general, resultados fructíferos al compararlos con la solución analítica del modelo. Hemos observado las divergencias de las principales propiedades del sistema al transicionar de fase. También se ha observado como al aumentar el tamaño de la red estudiada, los resultados se acercaban más a los valores termodinámicos esperados, dando validez a la teoría de tamaño finito.

Destacar que para mejorar los resultados se deberían tomar muchas más simulaciones, principalmente en torno a la temperatura crítica, donde las funciones termodinámicas fluctúan mucho y es fácil cometer errores a la hora de calcular los exponentes críticos de estas magnitudes. Con una nube de puntos abundante en torno a esta divergencia se podría haber estudiado con mayor rigor el comportamiento de la misma.

Referencias

- [1] https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lec_ising.
- [2] https://addi.ehu.es/bitstream/handle/10810/30543/TFG_Garcia_Berdote_Asier.pdf?sequence=1&isAllowed=y.
- [3] <http://www.fisica.unlp.edu.ar/academica/Members/rossigno/TD%20-%20Juan%20Muglia.pdf>.