

Modelación computacional de la transición de fase en el modelo de Ising*

Borja Martínez Ramírez, Arif Morán Velázquez, Luis Felipe Marino Palafox, and Daniel A. Velázquez C.
Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey

(Dated: December 6, 2023)

En este artículo se proporciona una exploración integral de las transiciones de fase y sus manifestaciones en sistemas clásicos y cuánticos desde la perspectiva de la termodinámica y la mecánica estadística, explorando el gas de Van der Waals y el modelo de Ising. Se hace la derivación de la ecuación de estado de Van der Waals a partir de la función de partición, ofreciendo entendimientos sobre el comportamiento de materiales como el nitrógeno. Se discute el efecto Joule-Thomson como un método práctico para la producción de nitrógeno líquido. Cambiando al modelo de Ising, se examina una transición de fase continua, utilizando simulaciones de Monte Carlo para investigar el comportamiento del sistema con variaciones en la temperatura y el tamaño de la red. Los resultados revelan patrones distintivos en energía y magnetización, mostrando la aparición de fenómenos críticos. La temperatura crítica se mantiene constante en diferentes tamaños de red, indicando un comportamiento universal. Se concluye discutiendo la estimación de exponentes críticos y la ausencia de una discontinuidad en energía y magnetización, destacando la naturaleza continua de la transición de fase.

I. INTRODUCCIÓN

La termodinámica es la rama de la física que estudia la energía, el calor y la temperatura mientras que la mecánica estadística es la rama de la física que estudia el comportamiento de los sistemas a nivel molecular.

Una transición de fase, una sustancia experimenta un cambio en su estado físico, transmutando de una fase sólida, líquida o gaseosa a otra fase. Cada elemento y sustancia puede pasar de una fase a otra bajo cierta combinación específica de temperatura y presión. Es posible clasificarlas según diferentes consideraciones, por ejemplo, según el cambio de estado, es decir, según el cambio que hagan si va de sólido a líquido, de líquido a gas o de sólido a gas y viceversa. También pueden ser clasificados por simetría, según si se trata de una transición de orden y desorden según su estructura interna.

Entre los sistemas que presentan transiciones de fase podemos identificar, por nombrar alguno, el agua, que experimenta transiciones de fase entre los estados sólido (hielo), líquido (agua) y gaseoso (vapor) a medida que cambia la temperatura y la presión; los materiales magnéticos, como el hierro, que pueden experimentar transiciones de fase a temperaturas críticas donde su magnetización cambia drásticamente; y los superconductores, materiales que a temperaturas muy bajas, experimentan una transición de fase y conducen electricidad sin resistencia.

En cuanto a lo que la mecánica estadística respecta, una transición de fase es un efecto de un cambio abrupto en las propiedades macroscópicas del sistema relacionado con singularidades en los potenciales termodinámicos del sistema microscópico. Las propiedades macroscópicas de un sistema se pueden deducir de la energía libre o la función de partición. Dado que las transiciones de fase suelen implicar cambios dramáticos en varias funciones

de respuesta deben corresponder a singularidades en el libre.

La función de partición de un sistema se puede utilizar para calcular la probabilidad de que el sistema esté en un determinado estado. Esta probabilidad se puede utilizar para predecir el comportamiento del sistema, incluyendo las transiciones de fase. La expresión matemática con la que podemos encontrar la función de partición es:

En el modelo Cuántico (discreto):

$$Z = \sum e^{-\beta E_i} \quad (1)$$

En el caso clásico(continuo):

$$Z = \int e^{-\beta E_i} \quad (2)$$

Una vez encontrada la función de partición, se puede obtener la energía libre de la siguiente manera:

$$F = -k_B T \ln(Z) \quad (3)$$

Se busca analizar las transiciones de fase, utilizando en primera instancia un gas de Vander Waals y pasar al modelo de Ising, donde se trata con una transición continua, lo que significa que no tiene una discontinuidad en una derivada de la energía libre, sino en alguna derivada de orden superior.

II. ENTREGA 2: TRANSICIÓN DE FASE EN UN GAS DE VAN DER WAALS

ECUACION GAS VANDER WAALS

Esta transición es uno de los ejemplos más comunes de una transición de primer orden. Se procede a derivar esta ecuación de estado a partir de la función de partición.

Partimos de la derivación de la ecuación de estado para un gas ideal primero. Después, en vez de hacer que

el potencial de interacción sea cero, podemos suponer que es igual para todas las partículas, y depende sólo de la distancia promedio entre partículas.

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + U(q_1, \dots, q_N) \quad (4)$$

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int e^{\beta H} d^3p_1 \dots d^3p_N d^3q_1 d^3q_N$$

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int e^{\beta H} d^3p_1 \dots d^3p_N d^3q_1 d^3q_N$$

$$Z = \frac{V^N}{N!} \left(\frac{2\pi k_B T m}{h^2} \right)^{\frac{3N}{2}}$$

$$\lambda(T) = \frac{h}{\sqrt{2\pi k_B T m}} \quad (5)$$

$$Z = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3(T)} \right)^N \quad (6)$$

$$F = -k_B T \ln(Z)$$

$$F = -Nk_B T \ln(V) + k_B T \ln(N!) - \frac{3N}{2} k_B T \ln \left(\frac{2\pi k_B T m}{h^2} \right)$$

$$= -Nk_B T \left(\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi k_B T m}{h^2} \right) \right)$$

$$dF = -SdT - PdV + \mu dN$$

Investigando los coeficientes a y b correspondientes al nitrógeno y graficando las curvas isotérmicas para varias temperaturas, tenemos que:

a: 1.408 (L²bar/mol²) b: 0.03913 (L/mol)

En la práctica, una forma más común de producir nitrógeno líquido consiste en comprimir un gas dentro de un contenedor a una presión alta, y luego dejar escapar el gas lentamente. A esto se le llama el efecto Joule-Thomson. Explica cómo podrías utilizar esta idea para producir nitrógeno líquido. En la refrigeración por expansión para la producción de nitrógeno líquido se usa el efecto Joule-Thomson. En este proceso, el gas de nitrógeno a alta presión se deja expandir bruscamente

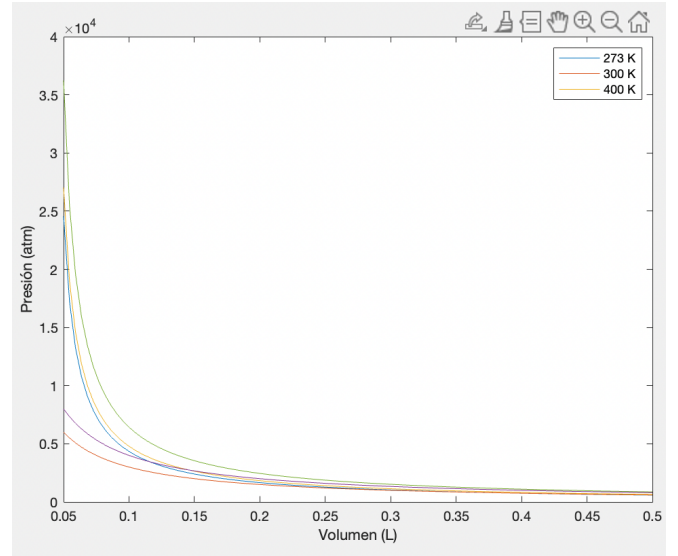


FIG. 1. Curvas isotérmicas a varias temperaturas para el nitrógeno y un gas ideal

a través de una válvula de restricción. Durante la expansión, el gas realiza trabajo contra la resistencia de la válvula, lo que provoca una caída de temperatura. Mediante la ecuación de Joule-Thomson se establece que la temperatura del gas disminuirá cuando se expanda bajo ciertas condiciones. Para el nitrógeno, el proceso se realiza a presiones y temperaturas que concuerden con sus puntos de fusión. El proceso de Joule-Thomson implica la expansión rápida de un gas a través de una válvula de restricción adiabática, lo que significa que no hay intercambio de calor con el entorno.

Primero el gas de nitrógeno se comprime a alta presión en un compresor, elevando su temperatura. Antes de expandirse, el gas se pasa a través de un intercambiador de calor para eliminar el calor generado durante la compresión y enfriar el gas a una temperatura más baja. Después el gas ahora enfriado se hace pasar rápidamente a través de una válvula de restricción. La presión disminuye abruptamente, y de acuerdo a la ecuación de Joule-Thomson, la temperatura del gas también disminuye significativamente. Durante la expansión, el gas realiza trabajo contra la restricción de la válvula. Este trabajo provoca una disminución de la energía cinética de las partículas del gas, lo que se traduce en una disminución de la temperatura. La temperatura del gas se reduce lo suficiente como para que el nitrógeno pase al estado líquido.

III. ENTREGA 3: MODELO DE ISING

En esta parte analizaremos un tipo diferente de transición de fase: las transiciones continuas. A diferencia del caso de un gas de Van der Waals, las transiciones continuas no tienen discontinuidad en su primer derivada de la

energía libre.

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (7)$$

$$E_i = -J \sigma_i \sum_j \sigma_j$$

IV. METODOLOGÍA

A lo largo de la simulación se utilizó el algoritmo de metrópolis. El algoritmo de Metrópolis aplicado al modelo de Ising es una técnica de simulación estocástica utilizada en física estadística para estudiar sistemas ferromagnéticos.

Para llevarlo a cabo se inicia con una red bidimensional de espines con valores iniciales asignados. Se elige aleatoriamente un espín, se propone un cambio en su orientación, y se evalúa la diferencia de energía según las interacciones vecinales del modelo de Ising. El cambio se acepta o rechaza utilizando la regla de aceptación de Metrópolis ec.8, basada en la variación de energía y la temperatura del sistema. La red se actualiza en consecuencia, y este proceso se repite para múltiples puntos e iteraciones, permitiendo que el sistema evolucione hacia el equilibrio térmico. Este algoritmo es esencial para simular configuraciones equilibradas térmicamente y estudiar propiedades macroscópicas de materiales ferromagnéticos en la teoría de la materia condensada.

$$P_{acceptar} = e^{-\frac{\Delta E(\sigma \rightarrow \sigma')}{T}} \quad (8)$$

El número de tanto estados de equilibrio como de Montecarlo fue de 32^2 . Posteriormente, se obtuvo la secuencia de estados para M experimentos, en este caso M= 100, para las temperaturas reducidas con un sistema de N^2 spins. Para cada uno de los casos se graficó la energía de los M experimentos y la Magnetización a lo largo de la secuencia de estados de Montecarlo y posteriormente de las temperaturas.

Posteriormente, se corrió el código para 100 valores de Temperatura y se realizaron M=100, experimentos. A partir de estos resultados, se obtuvo la energía promedio de los M experimentos para cada Temperatura. Asimismo, se obtuvo la magnetización $\langle |M| \rangle$. Además se obtuvo el calor específico C_V y la susceptibilidad Magnética $\chi(T)$ a partir de la desviación estándar de la energía a lo largo de los estados de Montecarlo, la magnetización se hizo el mismo procedimiento pero con la magnetización. Sin embargo, al igual que la energía y la Magnetización, se trabajó con promedios de M experimentos, es decir, $\langle \chi(T) \rangle$ y $\langle C_V(T) \rangle$.

$$C_V = \frac{\sigma_E^2}{T}$$

$$\chi = \frac{\sigma_M^2}{T^2}$$

Una vez que se estudió el comportamiento de las distintas variables del sistema para una N fija, se trabajó variando N y se realizaron las mismas simulaciones. Esto a fin de estudiar el cambio del comportamiento de T y T_c se cambia este parámetro.

Para estudiar la temperatura crítica (T_c), se tomó este como en aquel punto en el que el valor promedio del calor específico es máximo $\langle C_V(T) \rangle$.

V. RESULTADOS

Al observar la figura 1, observamos como en una temperatura de 1.8, la magnetización toma dos valores principalmente, 1 o -1; sin embargo, al correr la simulación para valores más altos $T = 2.3$ y 3, vemos como esta tendencia de valores de 1 y -1 desaparecen, sino que tienden a tomar valores cercanos a 0. En la última gráfica de la figura 1, observamos menor dispersión y una mayor intensidad alrededor del 0 lo cual indica que a bajas temperaturas el material alinea sus espines, mientras que a mayores temperaturas el material no se magnetiza y sus Espines se alinean en el material de tal manera que se cancelan. Por otro lado, al analizar el valor absoluto de la energía vemos que disminuye con respecto a la temperatura.

A medida que se aumenta el tamaño de N, Figura 2, la temperatura crítica no cambia. La energía permanece en la misma forma de S. La magnetización muestra un comportamiento en forma de una copa. Esto debido a que la magnetización a temperaturas bajas, puede tomar valores entre -1 y 1; sin embargo, a mayor temperatura, esta magnetización independientemente de su orientación desaparece. El calor específico muestra un comportamiento gaussiano, al igual que la susceptibilidad magnética. La cual nos indica la temperatura crítica y, por lo tanto, ocurre una transición de fase en este punto, lo cual en este caso resulta en un material paramagnético.

En esta figura se observa que para una Temperatura para 100 experimentos, ($T = 1.7$), al ir aumentando el número de estados de Montecarlo, se van formando y agrupando los iguales. Posteriormente, las regiones se van reduciendo en tamaño hasta desaparecer. Sin embargo, para temperaturas más altas como se ve en la figura 2. estas regiones no se forman, sino que el sistema está en una mezcla homogénea de espines. provocando que el material no tenga un campo magnético neto apreciable.

Los exponentes críticos son magnitudes físicas que describen el comportamiento de las propiedades termodinámicas cercanas a transiciones de fase continuas. Estos exponentes clásicamente son descritos según la teoría de Landau, que propone que un exponente crítico

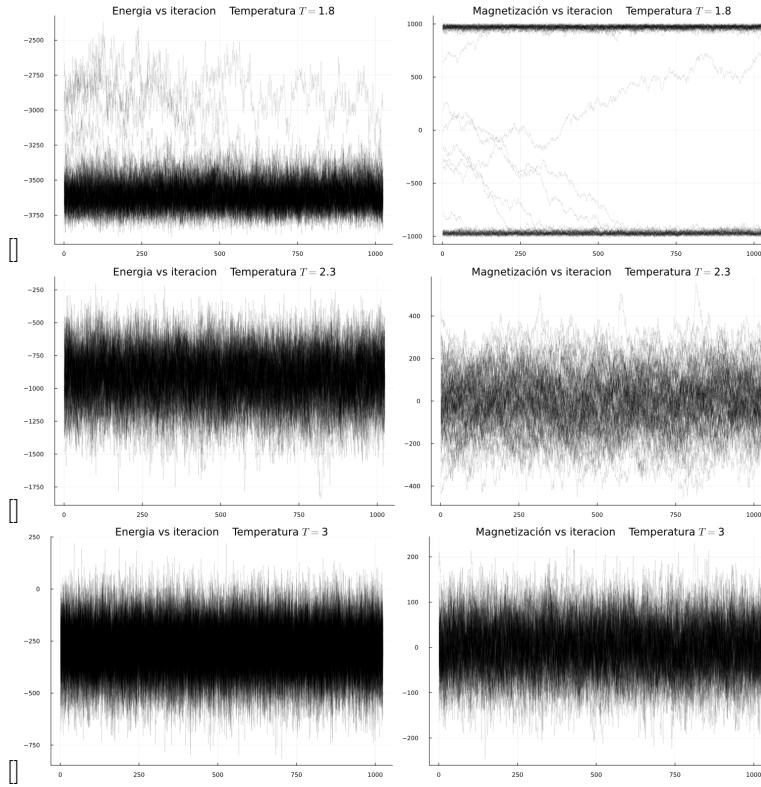


FIG. 2. Gráfica de Energía(E) y Magnetización (M) vs iteración de montecarlo para una Temperatura($T = 1.8, 2.3, 3$), Experimentos= 100

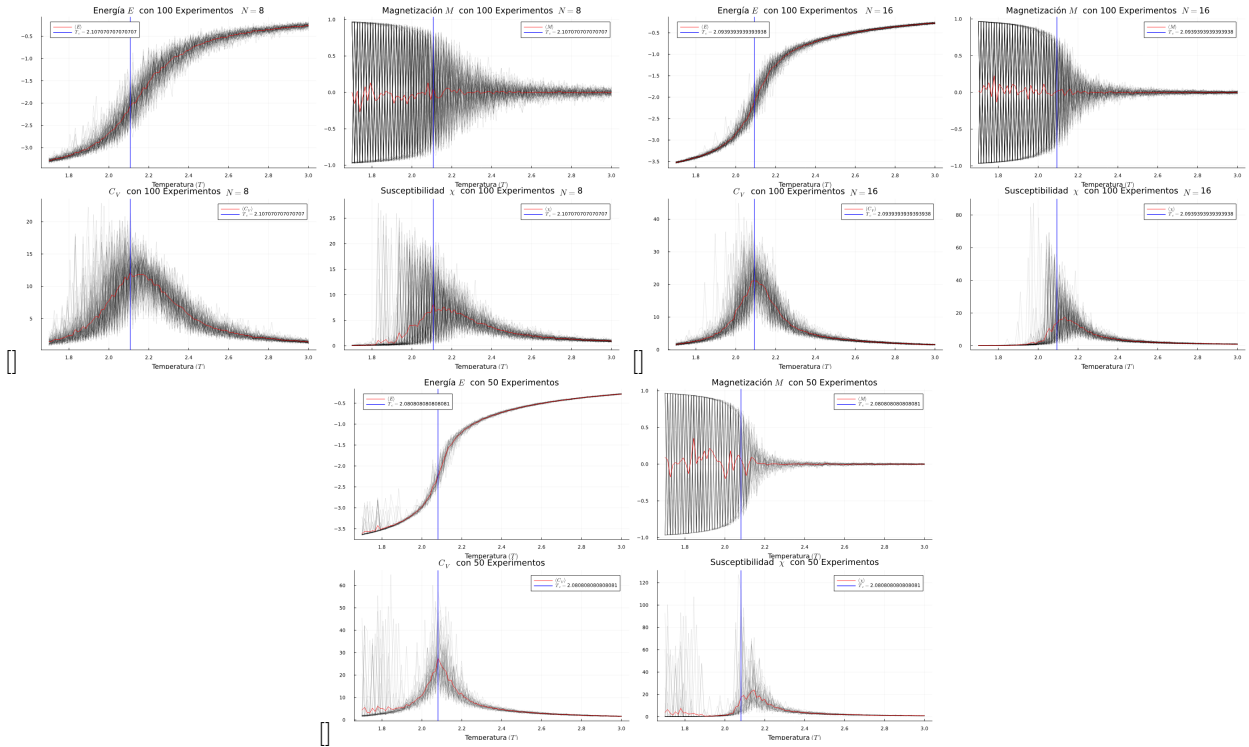


FIG. 3. En esta figura se muestra el comportamiento en función de la Temperatura, de la energía (E), Magnetización (M), Calor específico (C_V) y la Susceptibilidad Magnética (χ) con 32^2 movimientos de Montecarlo.

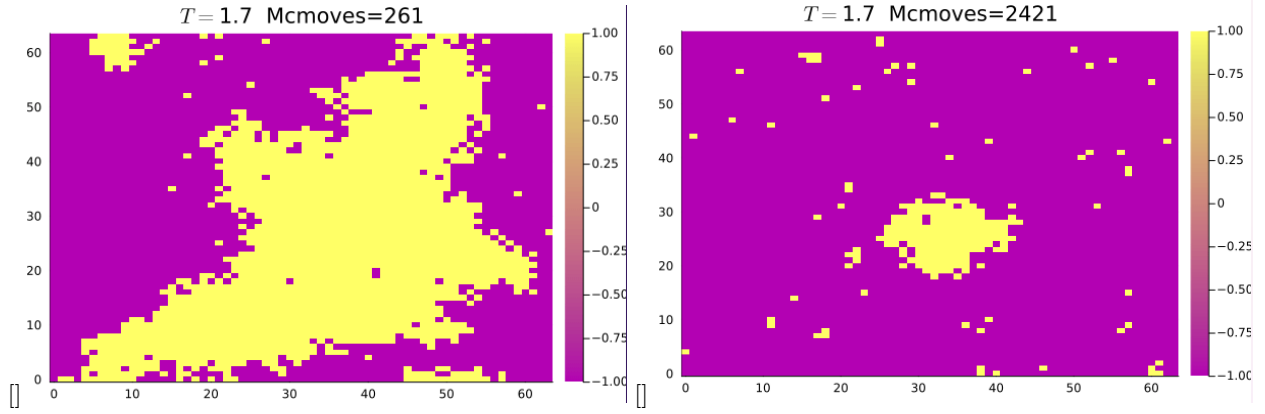


FIG. 4. (a) $T = 1.7N = 32^2$, evolución de acuerdo al numero de estados de Montecarlo para una temperatura de 1.7

κ se puede encontrar según:

$$\kappa = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\log|f(\tau)|}{\log|\tau|} \quad (9)$$

Dónde τ es la temperatura reducida y se encuentra a partir de:

$$\tau = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (10)$$

Y $f(t)$ cuando τ tiende a 0 es una serie de potencia de la forma de:

$$f(t) = A\tau^\kappa(1 + b\tau^{\kappa_1} + \dots) \quad (11)$$

El modelo de Landau nos da los valores de cuatro exponentes críticos para un campo escalar, como el modelo de Ising. Estos cuatro valores son:

$$\alpha = 0, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \delta = 3 \quad (12)$$

Dónde α se relaciona con calor específico, β con el parámetro de orden, γ con la susceptibilidad eléctrica y la compresibilidad, y δ con campo fuente y el parámetro de orden.

VI. CONCLUSIONES

A lo largo de este trabajo analizamos, características y procesos cuando las sustancias en cuestión estén cerca de transiciones de fase, a través de los conceptos de termodinámica y mecánica estadística. Para esto primero nos concentramos en el analisis de las transiciones de fase de los gases de Van de Waals. En particular nos centramos en las relaciones entre temperatura, volumen, y estado de la materia del nitrógeno a una presión de una atmosfera. Finalmente, simulamos el sistema termodinámico ferromagnético del modelo de Ising, dónde uno de nuestros principales hallazgos consistió en explorar el efecto de los estados de Montecarlo, Asimismo nos

dimos cuenta de que a mayor temperatura los materiales, dejan de ser magnéticos. Esto lo vimos a partir de la temperatura crítica y de su magnetización. De acuerdo a la simulación, la temperatura crítica T_c es independiente de N , ya que obtuvimos los mismos resultados para $N = 8, 16, 32$. Por otro lado, cuando los materiales aún eran capaces de alinear sus espines, pudimos ver como se van agrupando formando islas y posteriormente formando un estado homogéneo. A lo largo del desarrollo de las simulaciones, una de las principales limitantes constó en el coste computacional, ya que lo máximo que fue capaz de realizarse fue de $N = 32$, por otro lado, los pasos de equilibrio y de estados de Montecarlo fue de 32^2 , a pesar de cambiar el procedimiento de calcular la energía a partir de convolución en lugar de usar 2 operaciones "for" anidados.

VII. BIBLIOGRAFÍA

- Huang, K. (1987). Statistical Mechanics. John Wiley & Sons.[PDF]. Recuperado de <https://drive.google.com/file/d/1MKXz8-4V8XbbFKxKAH52s2A7v5gT5fg9/view>
- Chandler, D. (1987). Introduction to Modern Statistical Mechanics. Oxford University Press.[PDF]. Recuperado de https://www.academia.edu/41561113/INTRODUCTION_TO_MODERN_STATISTICAL_MECHANICS_and_associated_companies.inz
- HOOFT, G & VELTMAN, M. (1972). REGULARIZATION AND RENORMALIZATION OF GAUGE FIELDS. Recuperado de https://webpace.science.uu.nl/~hooft101/gthpub/regularization_renormalization.pdf
- Stanford University. (2011). Hand-out 12. Ising Model. Recuperado de http://micro.stanford.edu/~caiwei/me334/Chap12_Ising

_Model.v04.pdf