

Laboratorio 4

Ezequiel Cabrera

Introducción:

El estudio de sistemas complejos, un enfoque analítico, usualmente no puede ser tomado, por lo que se implementan técnicas numéricas en conjunto con la estadística dominante del sistema, para así determinar propiedades macroscópicas. Los métodos numéricos empleados son de Dinámica Molecular (con un enfoque en las ecuaciones que gobiernan la dinámica del problema) o, el método empleado en este laboratorio, Monte Carlo (con un enfoque en la evolución configuracional).

Para este trabajo se implementaron métodos de Monte Carlo Metropolis para estudiar las propiedades termodinámicas para el modelo de Ising 2D sin campo aplicado con condiciones periódicas de contorno empleando diversos tamaños de red. Para tratar la evolución configuracional del sistema se utilizará la estadística de Maxwell-Boltzman y los puntos dentro de la red serán recorridos de manera aleatoria, para de esta manera evitar correlaciones entre el flip de dos espines adyacentes.

Resultados:

1. Modelo de Ising 2D:

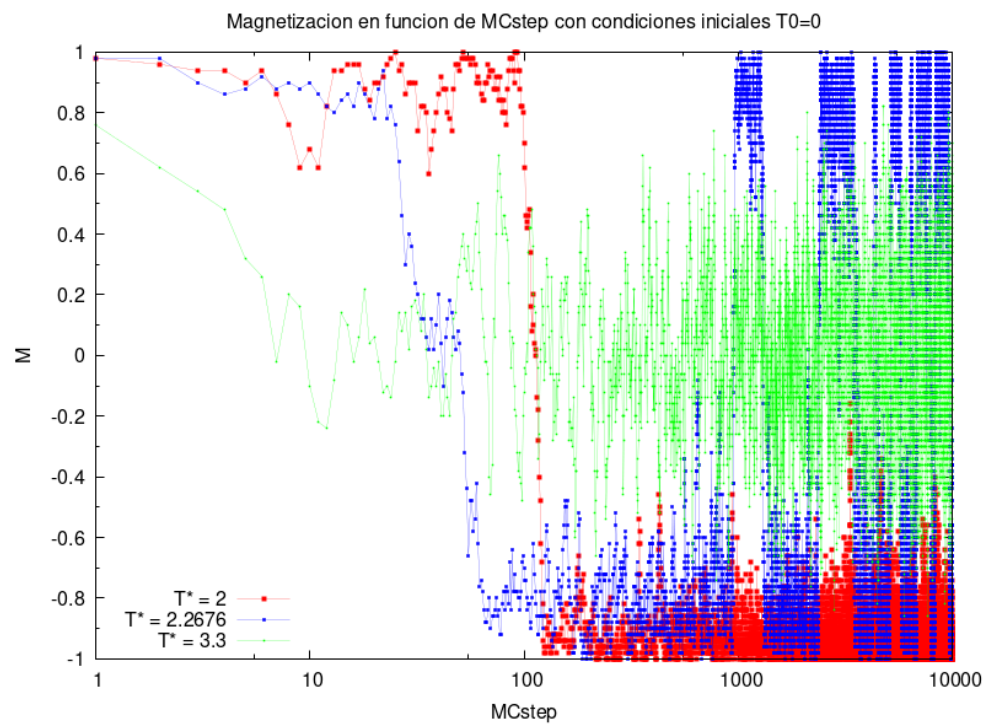
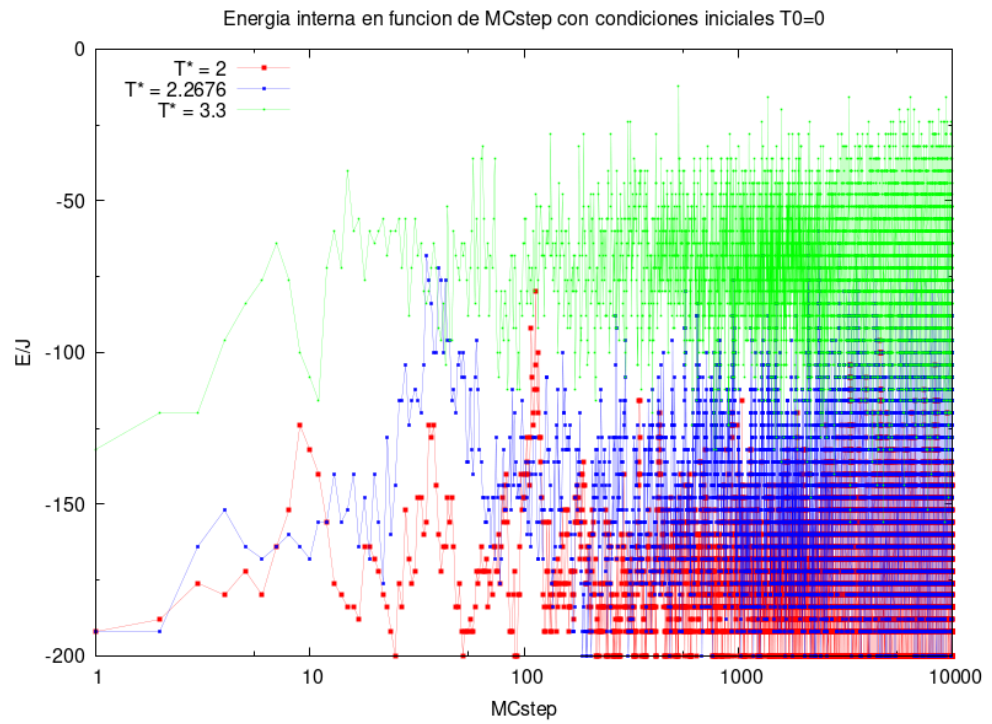
$$H = -J \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$
$$T = k_b T_c / J$$

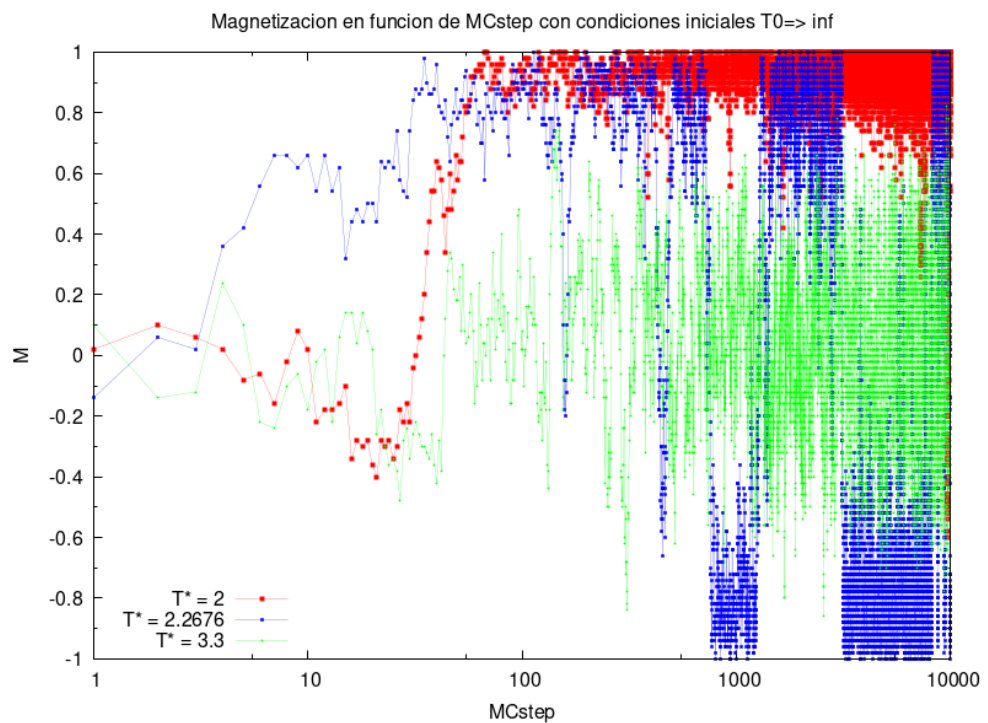
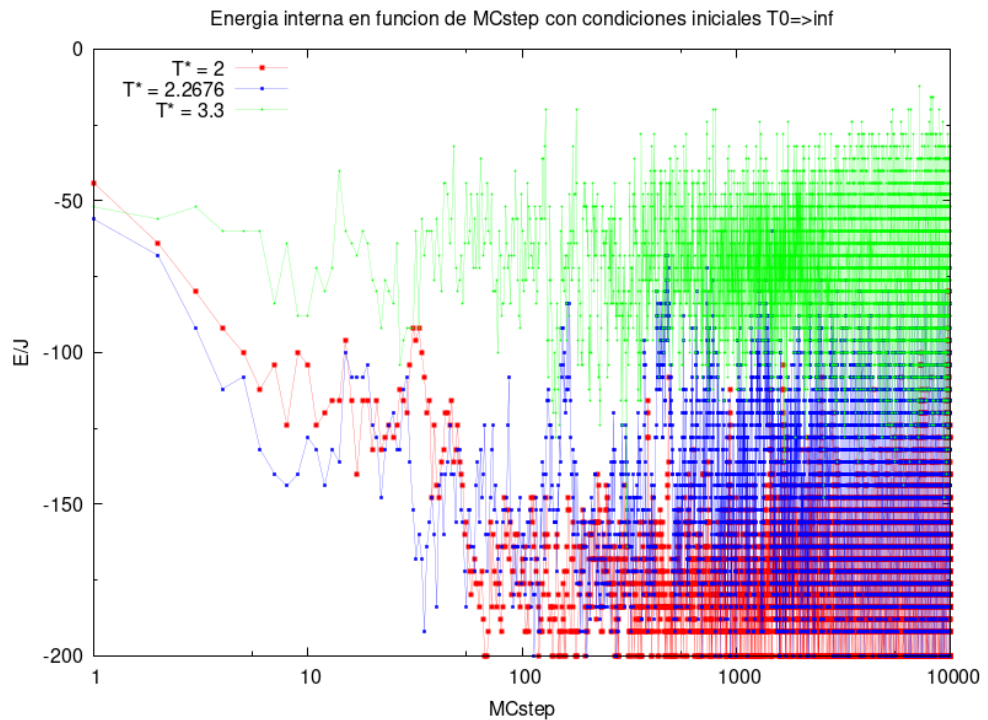
- a)** Se tomaron 10000 pasos de MC para las T indicadas, en cada paso de MC se sortean 1600 espines dentro de la red para determinar si se debe o no cambiar su espín mediante el criterio de Metropolis siguiendo la estadística de Maxwell-Boltzman para ΔE a dada T :

$$p = \exp(-\Delta E / T^*)$$

con unidades de ΔE ya adimensionalizadas

Para el caso de la magnetización, esta se promedió sobre toda la red, para entregar valores de entre $[-1; 1]$.





El primer resultado observable es que la evolución del sistema es independiente de la configuración, como era de esperar, y que solo depende del estado de equilibrio final a los que puede acceder el sistema.

Se puede ver que para estas temperaturas se puede considerar un tiempo de termalización de aproximadamente 500 pasos de MC para el

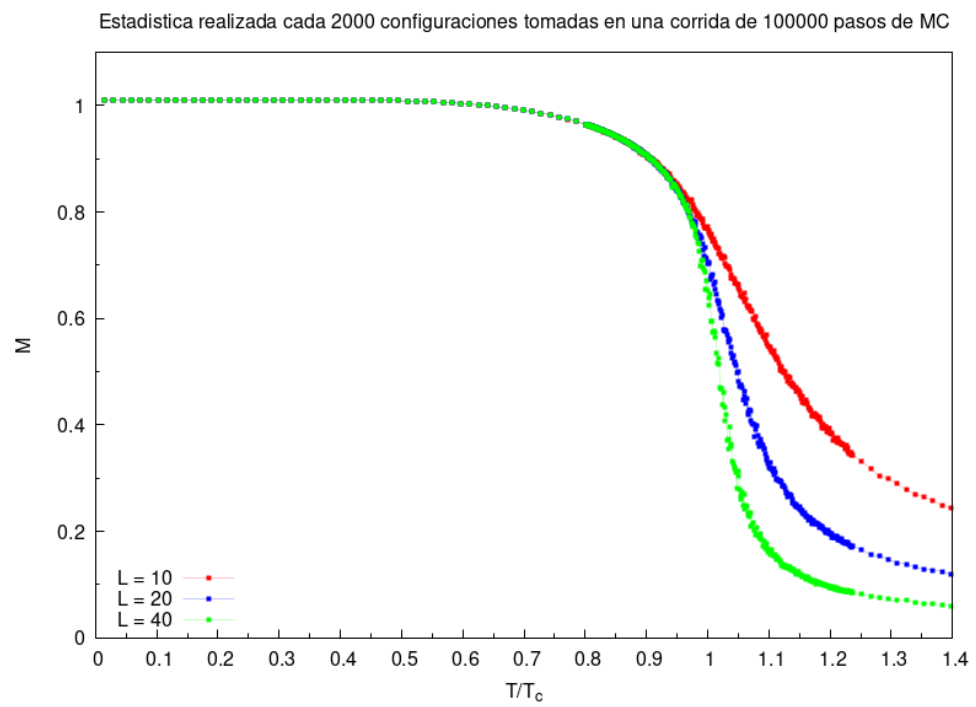
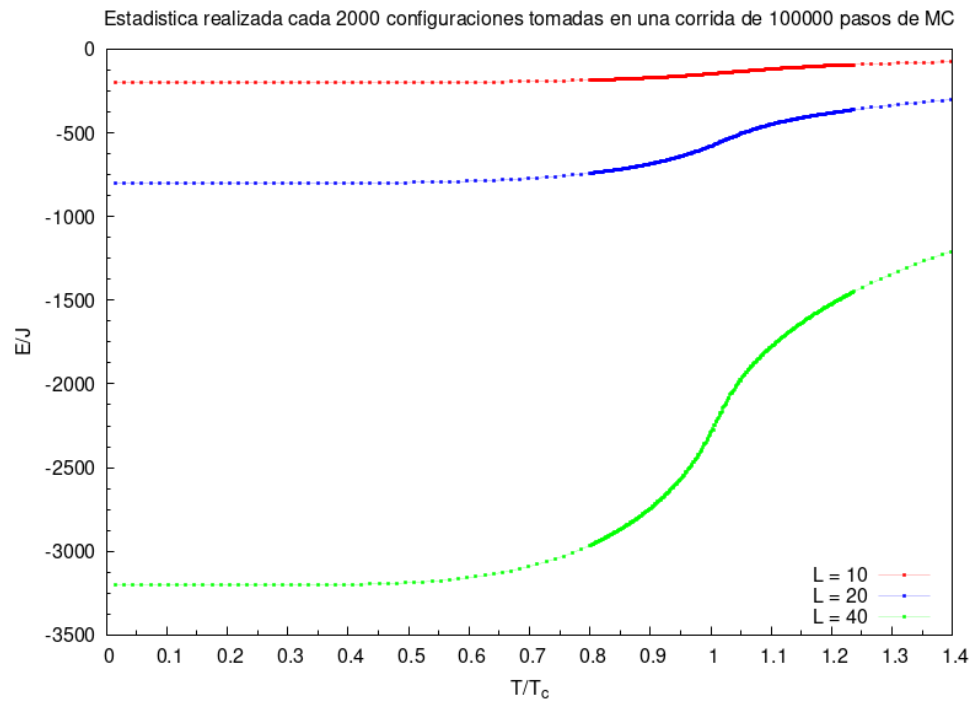
cual el sistema comienza a oscilar en torno a un valor medio. Para el caso de la magnetización a temperatura crítica, se puede ver que el valor oscila entre los extremos de -1 y 1 dado que a esta temperatura los mínimos se encuentran muy cerca en el espacio de las configuraciones, por lo que el sistema transita frecuentemente entre los dos mínimos. Si bien esta transición entre dos mínimos se ve que es frecuente en la temperatura crítica, se observa también que sucede para la temperatura inicial $T_0 = 0$ a aproximadamente los 100 pasos de MC, pero esto se vuelve cada vez menos frecuente a medida que $T \rightarrow 0$.

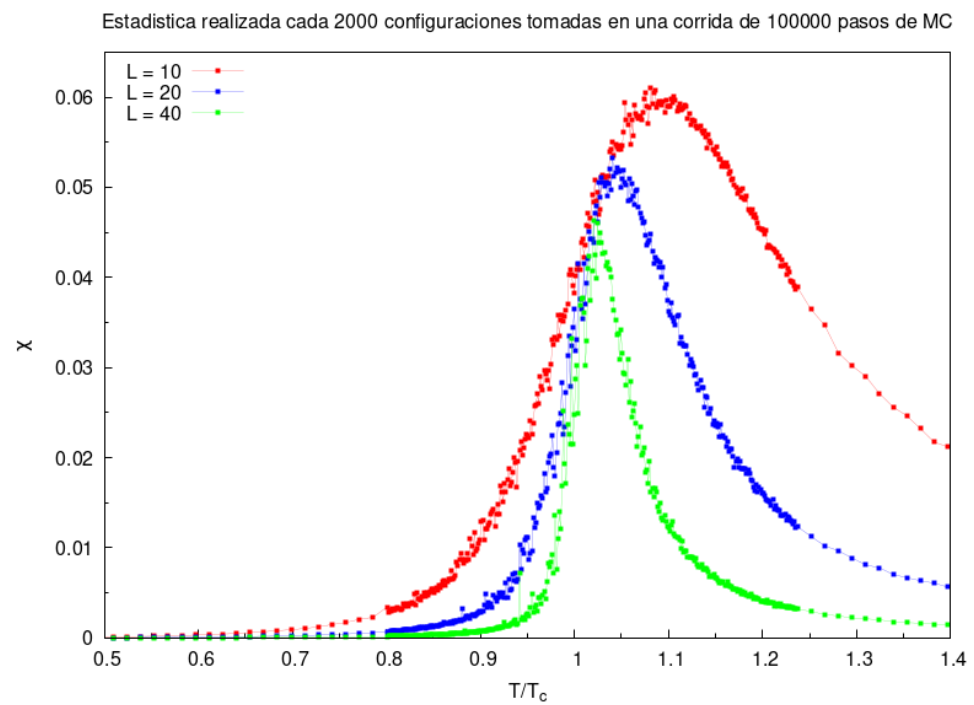
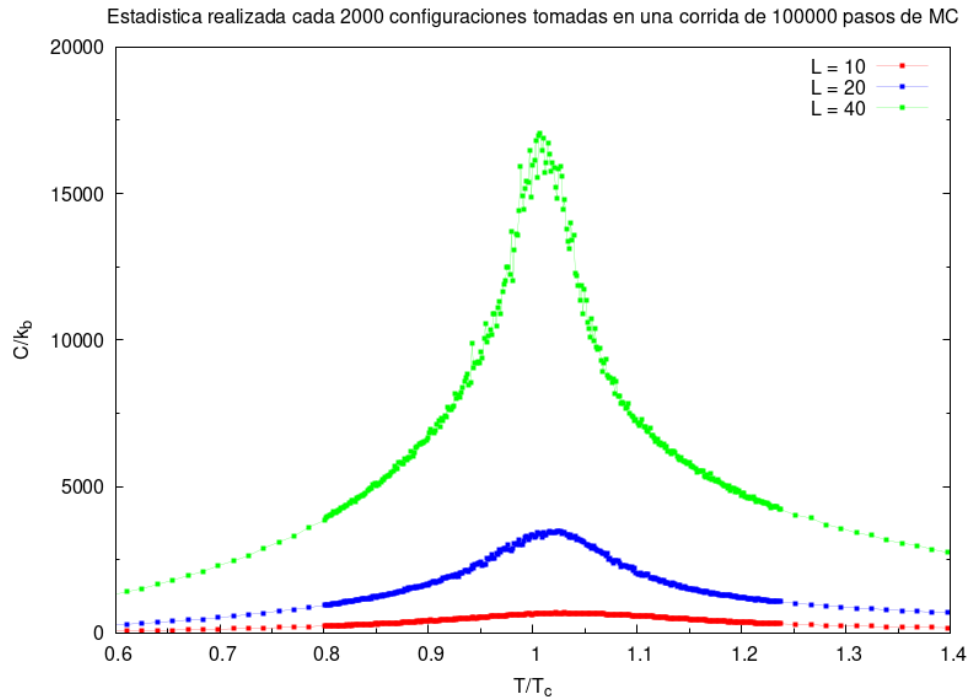
Ya para temperaturas más grandes, el factor estadístico de M-B se hace lo suficientemente grande para que cada espín que se sortea, tenga altas probabilidades de ser invertido, lo que genera que a cada paso de MC, la configuración sea con los espines dispuestos al azar, dando como resultado una magnetización de media nula.

Con respecto a la energía interna correspondiente a cada paso de MC se puede ver como esta es de media creciente a medida que T incrementa y los valores medios se encuentran próximos a ~ 75 para $T = 2$, ~ 150 para $T = T_c$ y ~ 175 para $T = 3.3$ todo en unidades de J .

b) Para realizar la estadística correspondiente a cada observable a temperatura T Se realizaron bloques de medición de 2000 pasos de MC en una simulación de 100000 de pasos, sobre los cuales se les tomó la media para representar cada punto.

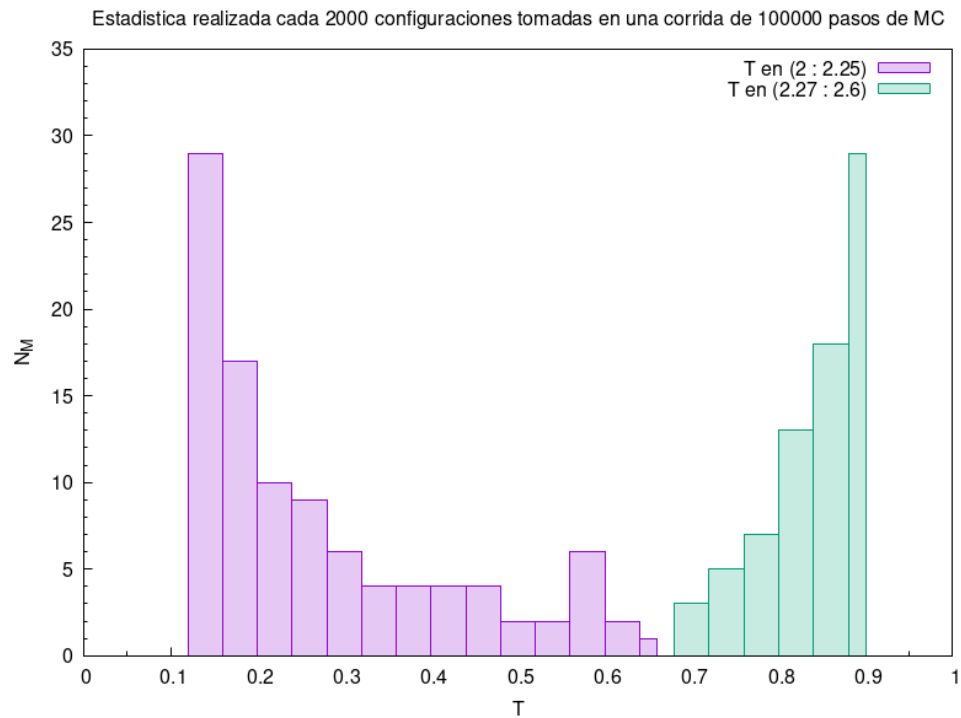
En particular, para las temperaturas próximas a T_c se consideraron adicionalmente 10 puntos para generar una mayor densidad de datos para generar una mejor estadística.





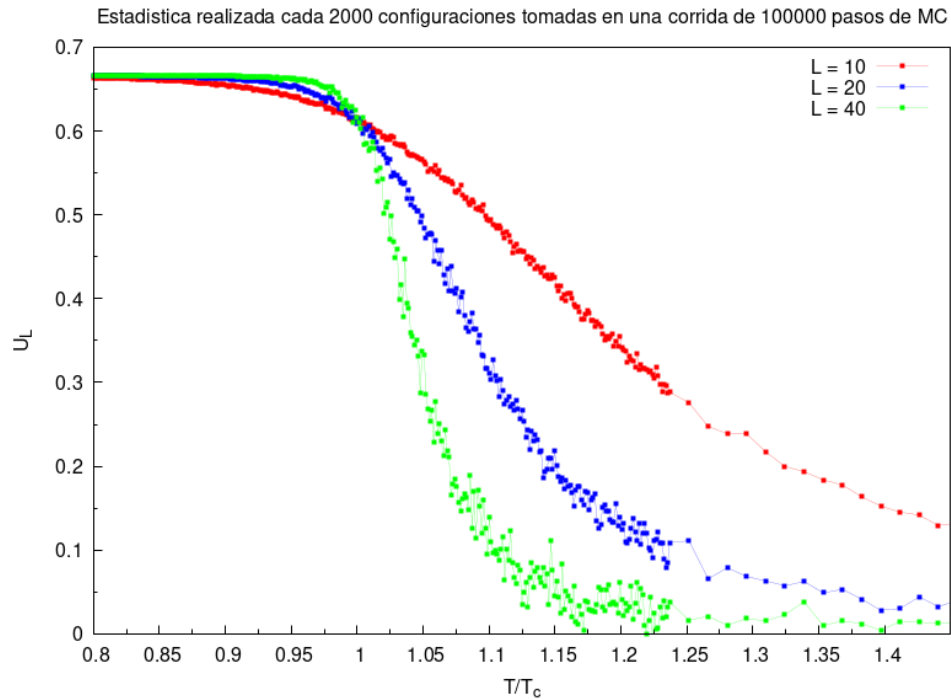
Se observa como los picos en la susceptibilidad y en el calor específico se aproximan a T_c a medida que el tamaño de la red crece, siendo apreciable de esta manera los efectos de tamaño inducidos al considerar una red de tamaño finito.

- c) Para el histograma se utilizaron como puntos anteriores las temperaturas correspondientes al intervalo de (2: 2.25) y como puntos posteriores, las temperaturas dentro del intervalo de (2.27: 2.6).



Los picos en los extremos señalan un cambio en la magnetización posterior a T_c , donde se puede ver como a temperaturas menores era predominante una polarización definida, mientras que para temperaturas superiores el sistema se desmagnetiza. Esto, en conjunto con los gráficos presentados en el inciso a) para $T = T_c$, pone en evidencia la magnetización inestable que se encuentra en este punto.

d)



Para estimar la temperatura crítica utilizando los cumulantes de Binder, se realizará un ajuste lineal para los valores próximos donde se interceptan las curvas correspondientes a cada tamaño de red.

El valor estimado de esta forma es:

$$T_c = 2.3 \pm 0.1$$

El valor medio estimado exacto es de 2.2659, lo cual es un estimativo muy bueno para la temperatura crítica del sistema.

Realizando un ajuste sobre las curvas obtenidas para diferentes tamaños de red se obtuvieron valores diversos para cada exponente crítico y el ajuste de cada función era muy dificultoso, los valores obtenidos se encontraban en el rango de 1.8 a 2.3 para el caso de γ y de 0.7 a 0.1 para el caso de β . Por lo que si bien se puede tener una estimación para estos exponentes, no arrojan valores certeros para la determinación del mismo.

Conclusión:

En lo que respecta a la determinación de la energía, magnetización y los cumulantes de Binder, se pudieron hacer de manera consistente con el marco teórico, obteniendo comportamientos, estados de equilibrio y estimaciones a T_c que coincidieron con los vistos en clase.

En lo que a la susceptibilidad y calor específico respecta, inicialmente en algunos regímenes se obtuvieron los resultados deseados, mientras que en temperaturas menores a la crítica los datos obtenidos de estos observables adquirieron valores negativos, lo que indicaba una región de comportamiento no físico, donde la fuente de error se encontraba en el código implementado.

Una vez corregidos dichos errores, el sistema presentó un comportamiento acorde a lo esperado físicamente.

Como conclusión final sobre el método numérico de Monte Carlo Metropolis se puede ver que arroja predicciones muy acertadas para los rangos de estados por fuera de los puntos críticos, y que en estos la evolución configuracional se vuelve inestable. Adicionalmente, se pueden obtener buenas aproximaciones, pero no valores certeros, para las constantes que caracterizan al sistema, como temperatura crítica y exponentes de transiciones de fases.