



Instituto de Tecnología Jorge Sabato  
Ingeniería en Materiales

Modelización de Propiedades y Procesos

**Trabajo final**  
**Aplicación del modelo de Ising a aleaciones**  
**binarias con el método de Montecarlo**

Piancatelli, Lucca

Prof. Weht, Rubén  
Prof. Forti, Mariano

Buenos Aires  
15 de julio de 2022

# INFORME

## CONTENIDO

1. INTRODUCCIÓN TEÓRICA.....	2
1.1 Modelo de Ising.....	2
1.2 Aplicación a aleaciones binarias.....	2
2. CÓDIGO.....	3
2.1 Algoritmo.....	3
2.2 Datos del problema.....	3
3. RESULTADOS.....	4
3.1 $J < 0$ .....	4
3.2 $J > 0$ .....	7
4. CONCLUSIONES.....	9
5. TRABAJO A FUTURO.....	10

## 1. INTRODUCCIÓN TEÓRICA

### 1.1 Modelo de Ising

El modelo de Ising es el modelo matemático del ferromagnetismo. Se parte de una grilla cuadrada de  $N \times N$  elementos y se asigna a cada uno un espín “up” (1) o “down” (-1). Estos interactúan con sus primeros vecinos con una energía de intercambio  $J$  si son paralelos y  $-J$  si son antiparalelos.

El hamiltoniano del sistema está dado por:


$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

donde  $\langle i, j \rangle$  indica la suma sobre los primeros vecinos,  $J$  es la energía de intercambio,  $s_{i,j} = \pm 1$  es el espín y  $H$  es la magnitud del campo magnético externo.

La probabilidad de transición entre dos estados  $W_1$  y  $W_2$  está dada por:

$$P(W_1 \rightarrow W_2) = \begin{cases} 1 & \text{si } \Delta E \leq 0 \\ e^{-\beta \cdot \Delta E} & \text{si } \Delta E > 0 \end{cases}$$

donde  $\Delta E = E_{W_2} - E_{W_1}$  es la variación de la energía entre ambos estados y  $\beta = (k_B T)^{-1}$ , siendo  $k_B$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura. Por lo tanto, la forma básica para resolver el modelo de Ising es a través del algoritmo de Metrópolis. Éste se resume en:

1. Se prepara una configuración inicial de espines aleatorios.
2. Se elige un sitio aleatoriamente y se varía su espín.
3. Se calcula la variación de energía  $\Delta E$ .
4. Si  $\Delta E < 0$ , se acepta el cambio. Si  $\Delta E > 0$ , se acepta el cambio con probabilidad  $e^{-\beta \cdot \Delta E}$ , lo que en la práctica se hace a través de un número aleatorio.
5. Se repiten los pasos 2 a 5. 

### 1.2 Aplicación a aleaciones binarias

Sea una aleación de átomos A y B, considerando interacciones a primeros vecinos en una red bidimensional cuadrada en la que cada sitio está ocupado por un átomo de A o de B, el hamiltoniano de la red está dado por:

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} \left\{ V^{AA} c_i c_j + V^{AB} [c_i (1 - c_j) + (1 - c_i) c_j] + V^{BB} (1 - c_i) (1 - c_j) \right\}$$

donde  $V$  es la energía de unión entre los átomos indicados por su superíndice y  $c_i$  es una variable que adopta valor 1 si el sitio está ocupado por un átomo A y 0 si está ocupado por un átomo B.

Esto puede adaptarse al modelo de Ising a partir del siguiente cambio de variable:

$$s_i = 2c_i - 1$$

donde  $s_i$  adopta valor 1 si el sitio  $i$  está ocupado por un átomo A y  $-1$  si está ocupado por un átomo B. De este modo, el hamiltoniano se reduce al de Ising, donde  $J$  queda determinada por:

$$J = \frac{-1}{4} (V^{AA} - 2V^{AB} + V^{BB})$$

y  $H$  se define a partir de los potenciales químicos  $\mu_A$  y  $\mu_B$  según:

$$H = \frac{1}{2}(\mu_A - \mu_B) - (V^{AA} - V^{BB})$$

## 2. CÓDIGO

### 2.1 Algoritmo

Hay dos modificaciones principales que hacer al código del modelo de Ising para aplicarlo a aleaciones binarias.

La primera modificación está en la configuración inicial. Para el modelo de Ising del ferromagnetismo, la configuración inicial de elementos con valores 1 y -1 admite que todos los elementos tengan espín “up” o “down” o cualquier mezcla de éstos. Sin embargo, en el modelo de aleaciones binarias existe una restricción en la cantidad de átomos disponibles en la aleación, dada por la proporción  $x$  de cada elemento:

$$\begin{aligned} \text{Átomos de A:} \quad N_A &= x_A \cdot N^2 \\ \text{Átomos de B:} \quad N_B &= x_B \cdot N^2 = (1 - x_A) \cdot N^2 = N^2 - N_A \end{aligned}$$

Por lo tanto, lo que se hizo para generar la configuración inicial fue generar un vector con  $N_A$  valores 1 y  $N_B$  valores -1 y aplicar la herramienta ‘`numpy.random.shuffle`’ para que la distribución sea aleatoria.

La segunda modificación tiene que ver con los movimientos de Montecarlo. Dado que las cantidades  $N_A$  y  $N_B$  deben conservarse, el movimiento no será modificar un espín, sino intercambiar dos elementos seleccionados aleatoriamente.

### 2.2 Datos del problema

Dado que en bibliografía no se han encontrado valores calculados de las energías de enlace  $V^{AA}$ ,  $V^{AB}$  y  $V^{BB}$  ni de los potenciales químicos  $\mu_A$  y  $\mu_B$  para alguna aleación binaria conocida, se han asumido valores genéricos.

$$\begin{aligned} V^{AA} &= \pm 1; V^{AB} = \pm 2; V^{BB} \\ \mu_A &= 0,2; \mu_B = 0,8 \end{aligned}$$

Estrictamente, éstos deben ser calculados por métodos *ab initio* de cálculos de primeros principios.

Se ha utilizado una grilla de  $30 \times 30$  elementos para modelizar la aleación al efectuar un compromiso empírico entre tiempo de cálculo y obtención de curvas de energía lo menos erráticas posible.

Se consideró  $k_B = 1$ . El barrido de temperaturas efectuado fue entre 4 y 0,1, con paso de 0,13.

Se hizo correr el programa para  $J$  positivo y para  $J$  negativo en varias composiciones de la aleación distintas, la mayoría cercanas a la equiatómica.

### 3. RESULTADOS

#### 3.1 $J < 0$

En las figuras 1 a 5 se observan los ordenamientos producidos para aleaciones AB con 40, 46, 50, 54 y 60 %A planteando una constante  $J = -0,5$ , con su correspondiente evolución de la energía y del calor específico en función de la temperatura.

Se observa una transformación de ordenamiento y la formación de una estructura de subredes interpenetradas en una solución sólida sustitucional. Al alejarse de la composición equiatómica hacia menores %A, hay átomos de B que deben ocupar sitios que naturalmente corresponderían a A. Lo inverso ocurre al ir hacia mayores %A.

En todos los casos se obtuvieron resultados erráticos para la temperatura de transformación, variando entre 0,88 y 1,14.

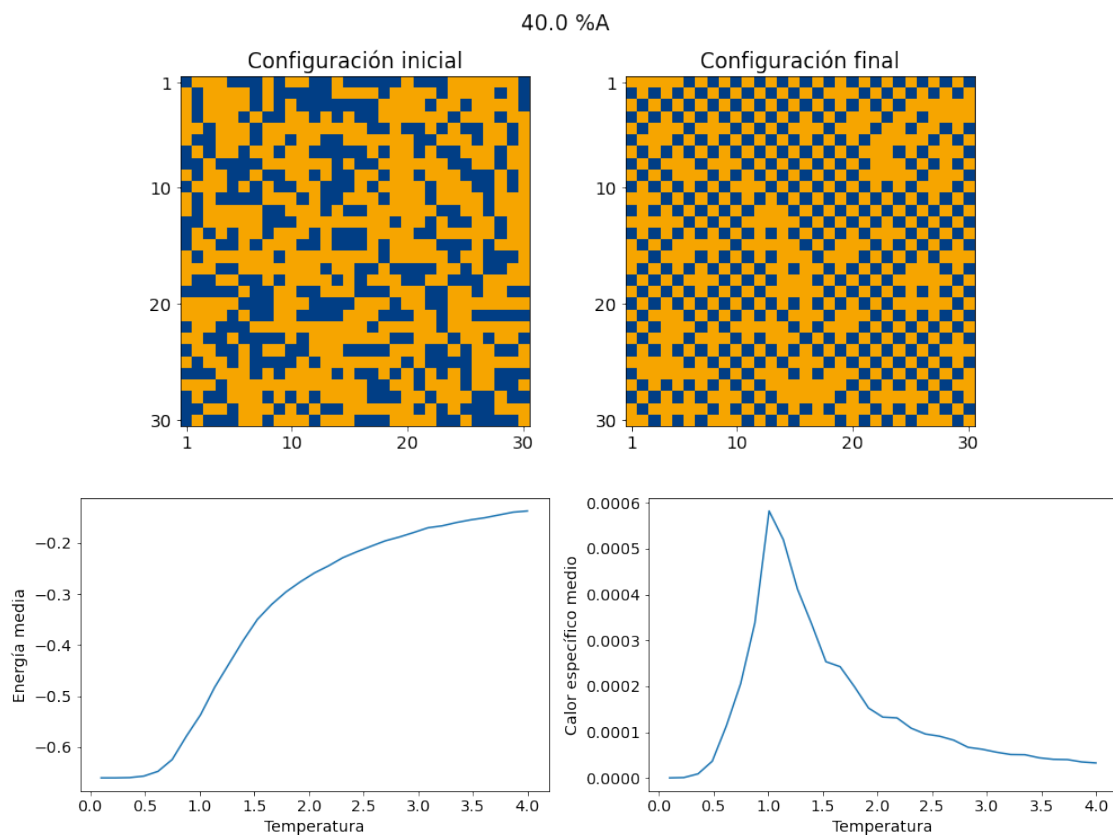


Figura 1

46.0 %A

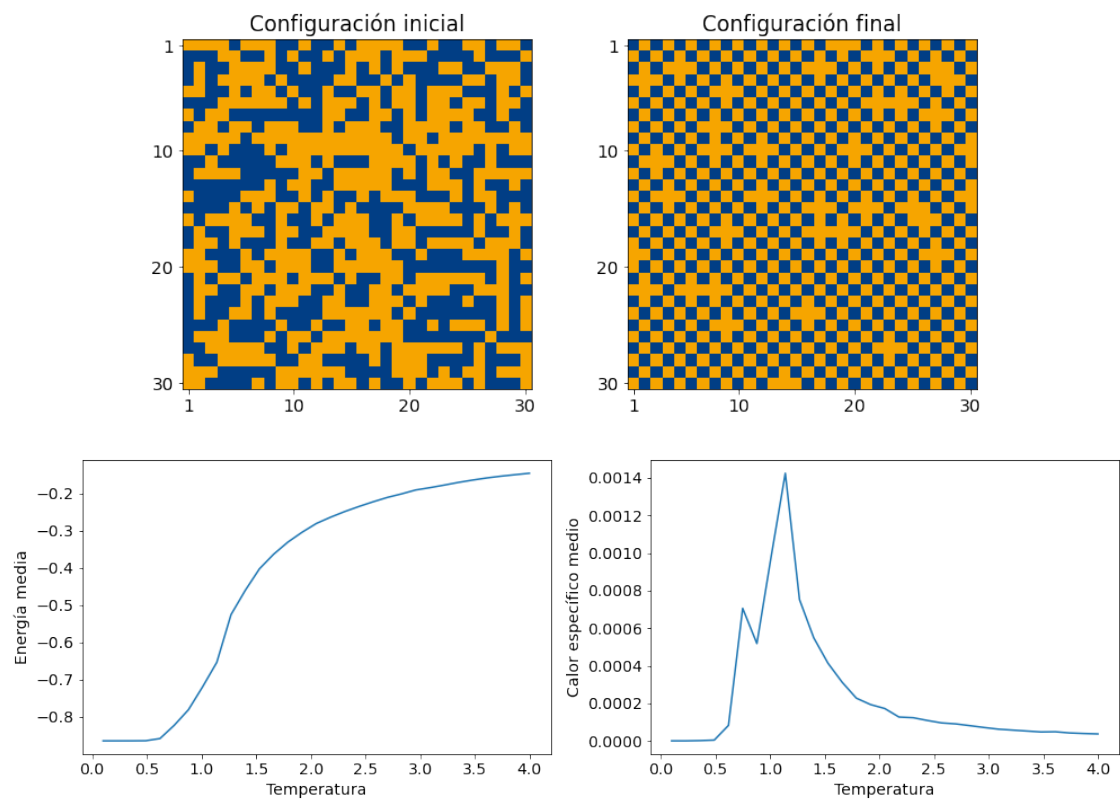


Figura 2

50.0 %A

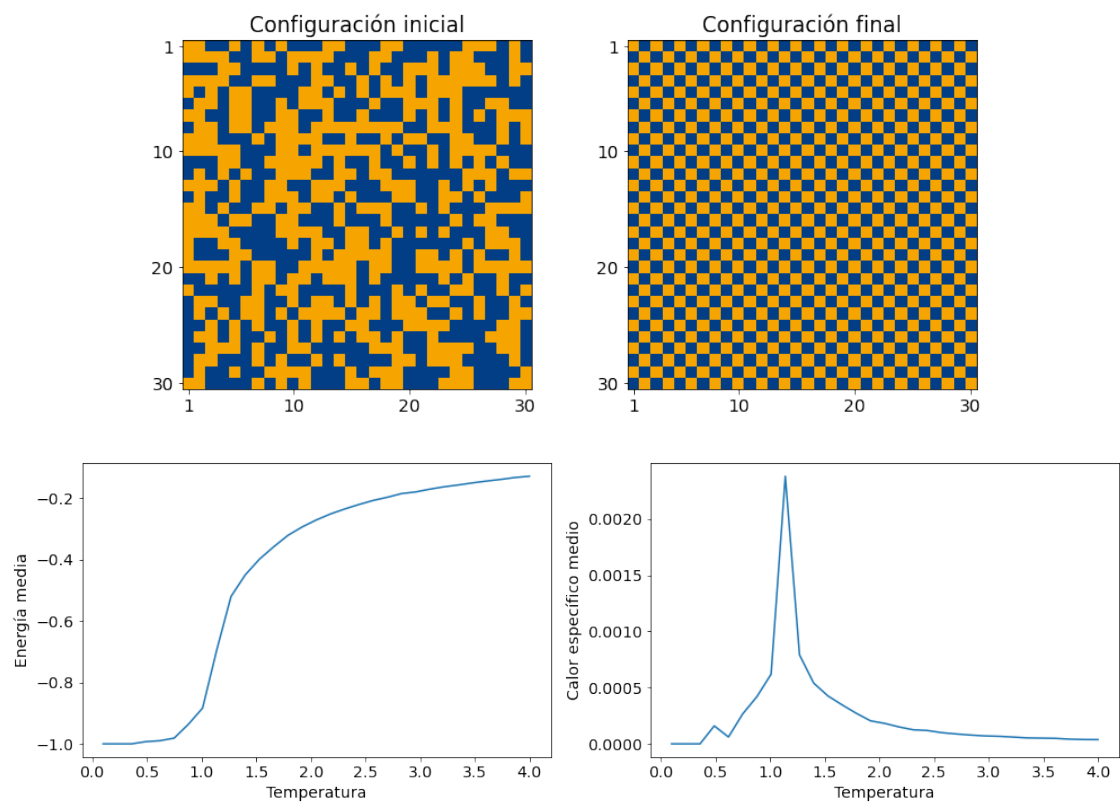


Figura 3

54.0 %A

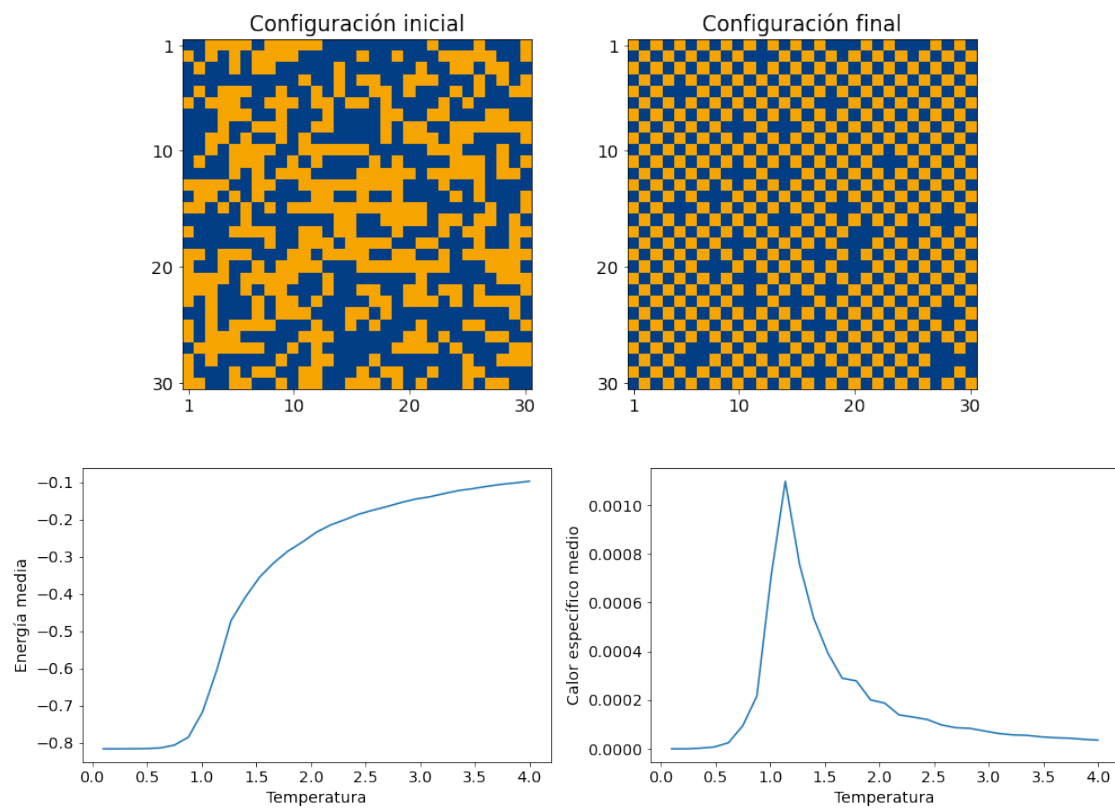


Figura 4

60.0 %A

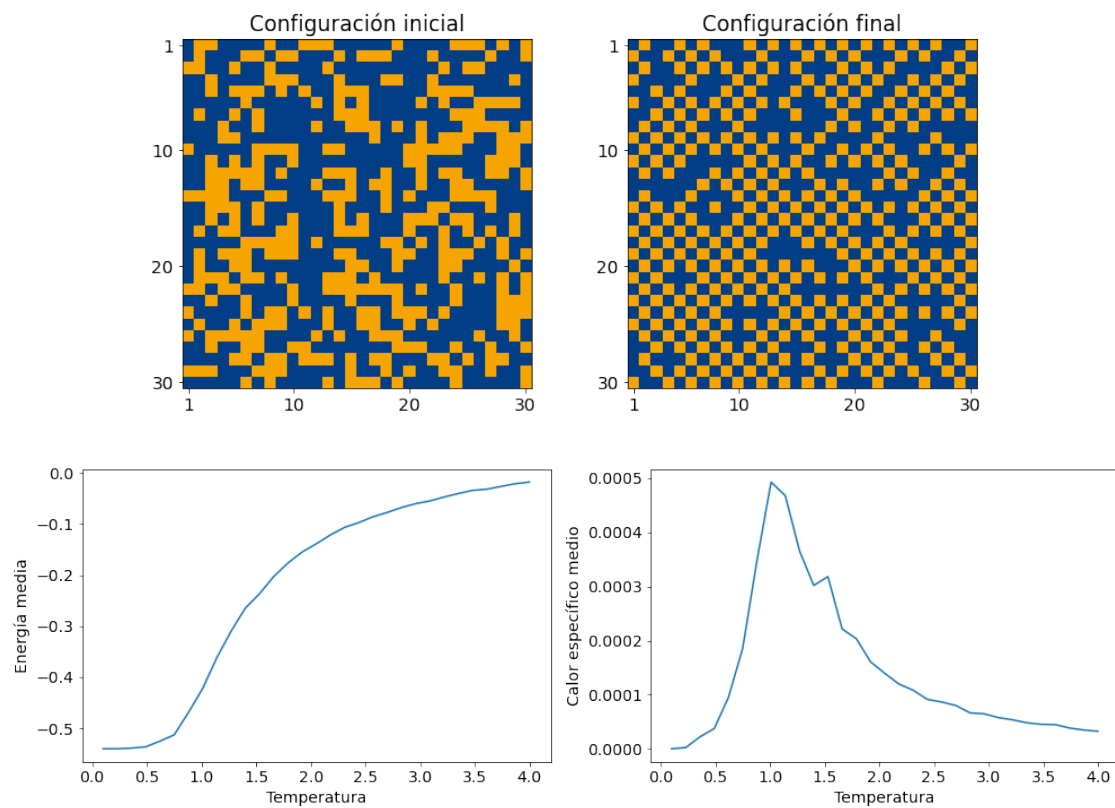


Figura 5

En las figuras 6 y 7 se observan los supuestos ordenamientos de aleaciones muy alejadas de la composición equiatómica. Se evidencia de esta manera que el algoritmo funciona para estas composiciones, pero no puede hablarse de ordenamiento.

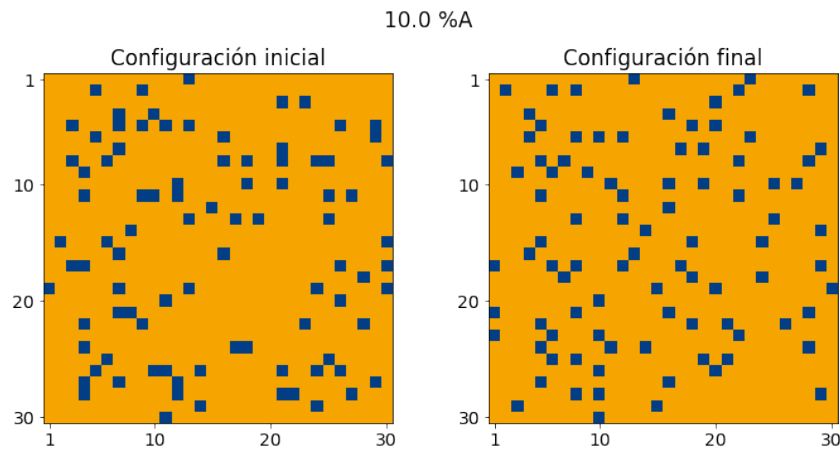


Figura 6

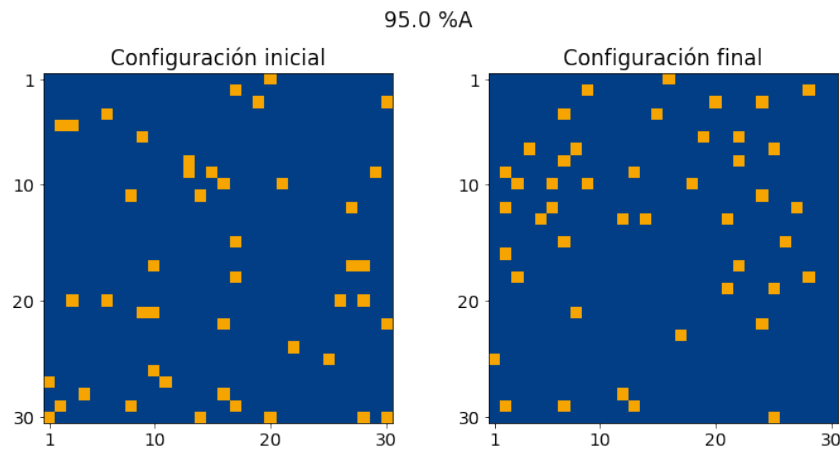


Figura 7

### 3.2 $J > 0$

En las figuras 8 a 10 se observan los ordenamientos producidos para aleaciones AB con 25, 50 y 75 %A planteando una constante  $J=+0,5$ , con su correspondiente evolución de la energía y del calor específico en función de la temperatura.

Se observa una separación en dos fases, una de cada elemento. En este caso, al alejarse de la composición equiatómica lo único que cambia es la proporción de cada fase, pero no hay defectos en el ordenamiento atómico.

En todos los casos se obtuvieron resultados erráticos para la temperatura de transformación, variando entre 0,88 y 1,14.



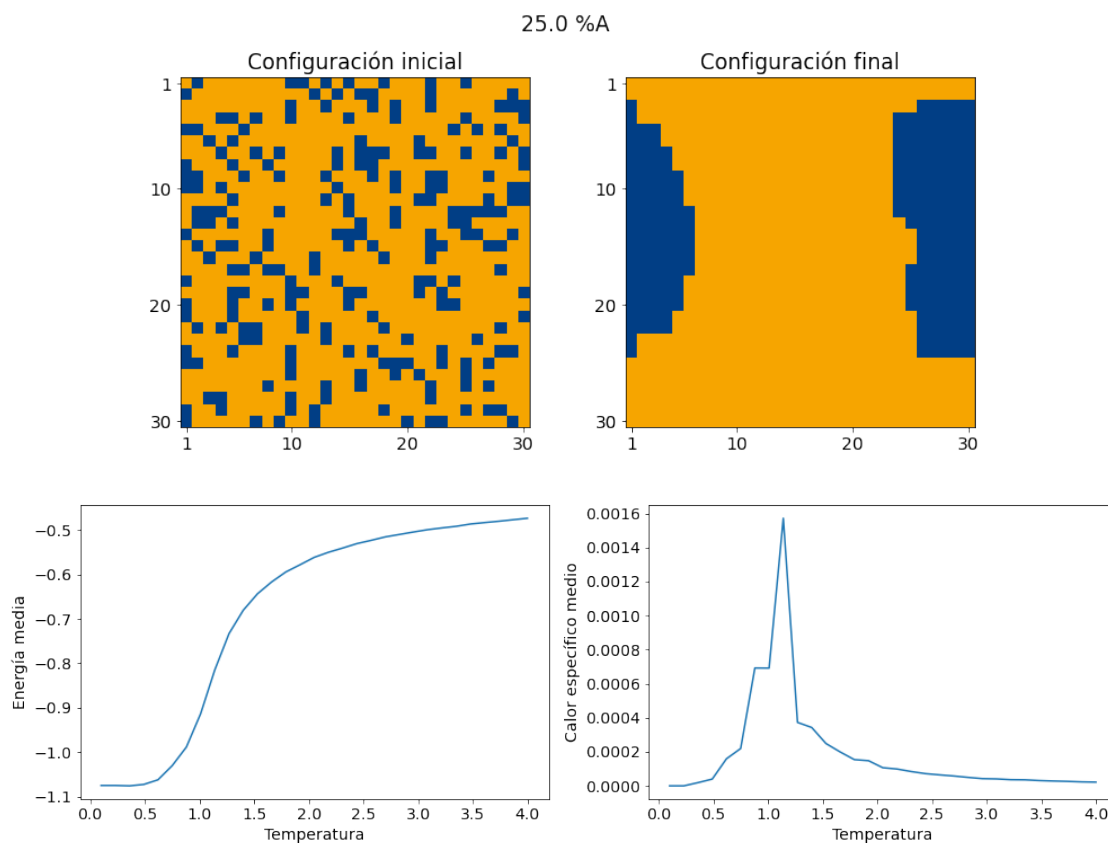


Figura 8

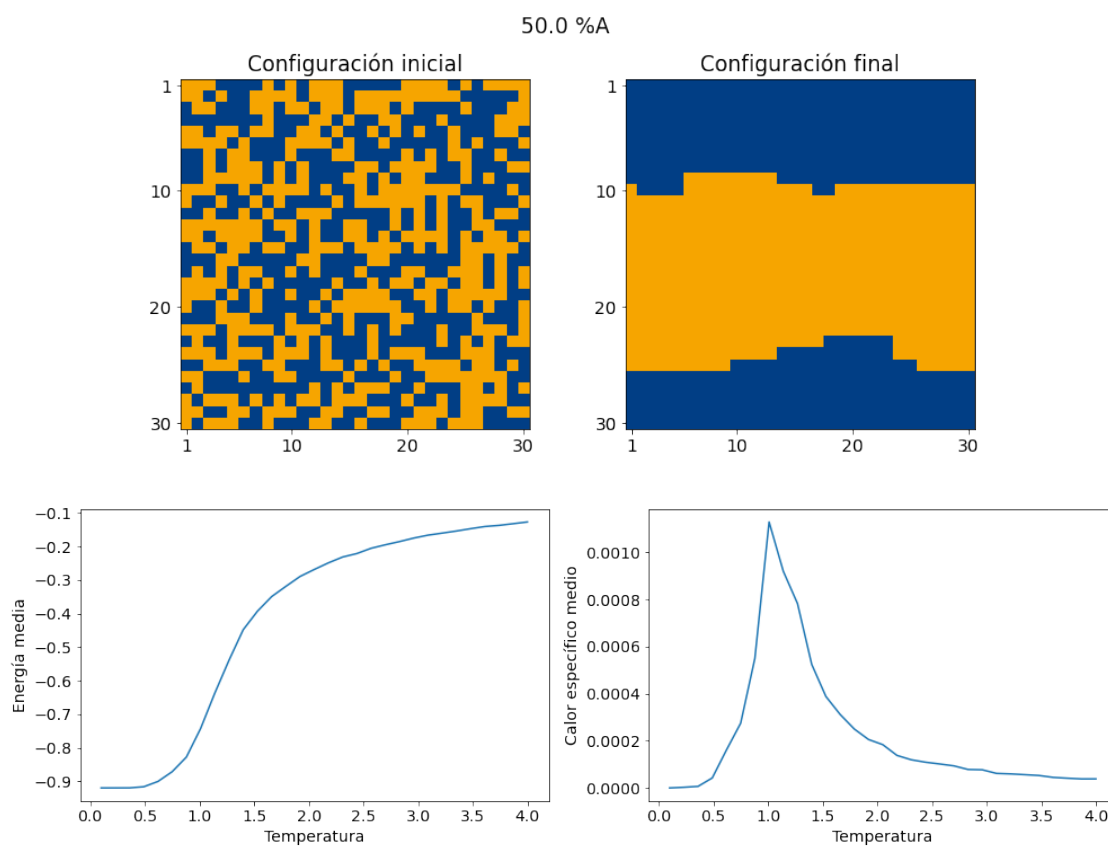


Figura 9

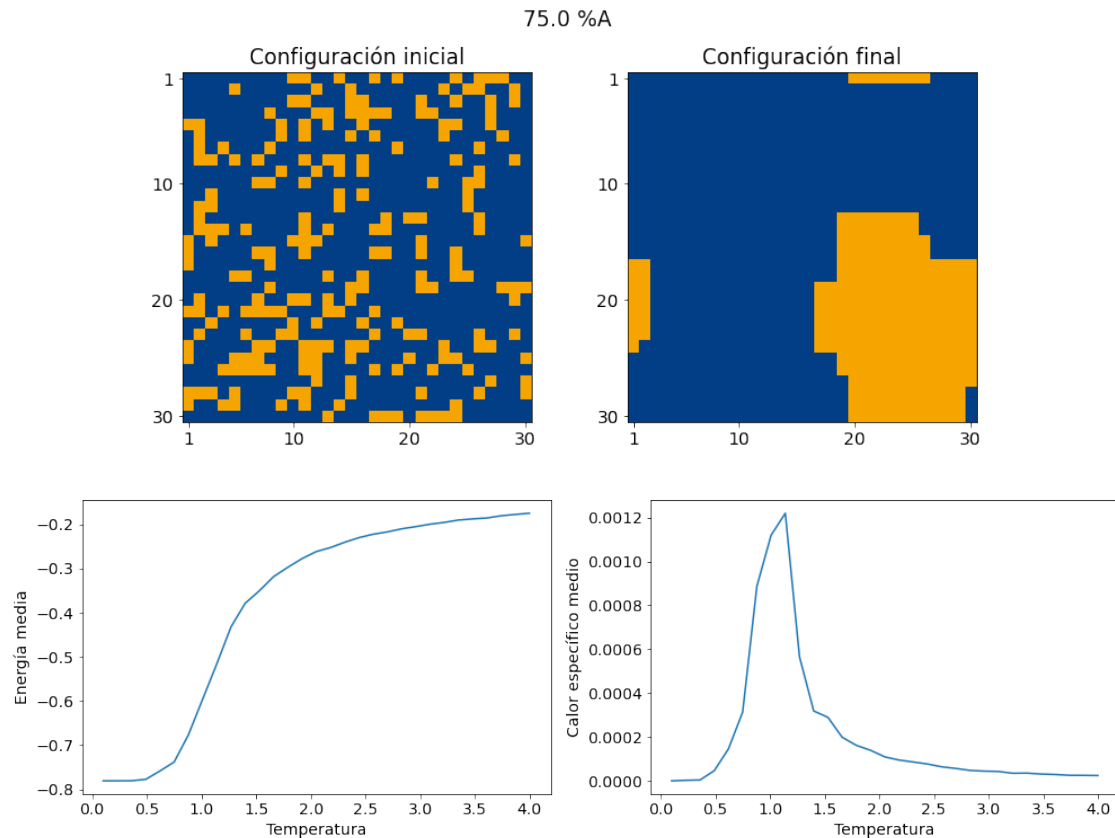


Figura 10

#### 4. CONCLUSIONES

Se ha estudiado el comportamiento de una aleación binaria bidimensional de tipo AB ( $L1_0$ ) por el método de Montecarlo a través del modelo de Ising para el magnetismo. Se ha adaptado dicho modelo teniendo en cuenta las restricciones de la composición de la aleación.

Los resultados obtenidos muestran un paralelismo entre el modelo de Ising para el magnetismo y el modelo modificado para aleaciones binarias en cuanto al signo de la constante  $J$ , lo que se encuentra detallado en la tabla 1.

	<i>Ising</i>	<i>Aleación binaria</i>
$J < 0$	Antiferromagnetismo	Ordenamiento
$J > 0$	Ferromagnetismo	Separación de fases

Tabla 1

Las temperaturas de transformación obtenidas se encontraron entre 0,88 y 1,14 en todos los casos. Sin embargo, estos resultados han sido erráticos y no se ha podido obtener información concluyente.

## 5. TRABAJO A FUTURO

Algunas mejoras que pueden hacerse al presente trabajo son:



- Calcular las energías de enlace y los potenciales químicos que no se han encontrado en bibliografía por métodos *ab initio* para alguna aleación en particular.
- Considerar la variación de los potenciales con la temperatura.
- Considerar una aleación tridimensional, permitiendo modelizar, por ejemplo, aleaciones de tipo  $AB_3$  ( $L1_2$ ).
- Considerar efectos de vacancias (modelo ABV).
- Considerar descomposición espinodal de la fase ordenada.
- Considerar interacción a segundos vecinos.
- Considerar el crecimiento de dominios que formarán bordes de antifase.