

# Simulazione numerica del modello di Ising2D

Angela Conaci, Francesco Zeno Costanzo

1 Marzo 2022

## 1 Introduzione

Lo scopo della simulazione è studiare il modello di Ising bidimensionale con relativa transizione di fase ferromagnetica. Si tratta di una transizione del secondo ordine che avviene a temperatura:  $\frac{1}{T_c} = \beta_c \simeq 0.4406868$ , avendo posto  $k_B = 1$ . La descrizione di questo fenomeno fisico è stata studiata mediante l'ausilio di un particolare metodo Monte Carlo: l'algoritmo Metropolis. La simulazione è stata fatta assumendo un reticolo bidimensionale quadrato.

### 1.1 Cenni teorici

Il modello di Ising, che rappresenta un modello classico utile per la descrizione dei comportamenti di materiali ferromagnetici, si basa sulla seguente Hamiltoniana:

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

dove  $\langle i, j \rangle$  identifica i primi vicini presenti sul reticolo,  $B$  il campo magnetico esterno; per questo progetto si assume  $k_B = 1$ ,  $J = 1$  e  $B = 0$ .

Trattandosi di una transizione di fase del secondo ordine, ci si aspetta attorno al punto critico una lunghezza di correlazione  $\xi$  divergente: questo comportamento è descritto dagli "indici critici", che determinano una relazione a legge di potenza fra le quantità termodinamiche e la temperatura ridotta  $t = \frac{T-T_c}{T_c} \propto \beta - \beta_c$ ; ovvero:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \\ \langle M \rangle \sim |t|^\beta \quad \text{per } T < T_c \quad \chi \sim |t|^{-\gamma} \quad C \sim |t|^{-\alpha}$$

da cui segue:

$$\langle |M| \rangle \sim |\xi|^{\beta/\nu} \quad \chi \sim |\xi|^{-\gamma/\nu} \quad C \sim |\xi|^{-\alpha/\nu}$$

Per dimensione finita del reticolo è necessario usare il modulo  $|M|$  al posto del vero parametro d'ordine  $M$ : quest'ultimo farebbe sempre zero anche per  $T < T_c$ , per simulazioni lunghe a piacere. Nel limite termodinamico le due quantità differiscono al più di un segno. Di seguito sono riportati i valori teorici degli esponenti critici:

$$\alpha = 0 \quad \beta = \frac{1}{8} \quad \gamma = \frac{7}{4} \quad \nu = 1$$

## 2 Simulazione

Per simulare il comportamento di un reticolo di spin si è usato l'algoritmo Metropolis, il quale permette di campionare una distribuzione conoscendo soltanto una funzione ad essa proporzionale. Si tratta di provare ad invertire gli spin del reticolo, uno alla volta, secondo un test di accettazione eseguito in modo da garantire la corretta distribuzione delle configurazioni di spin campionate. Le quantità termodinamiche sono state calcolate nel seguente modo:

$$C = \frac{\langle \varepsilon^2 \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2}{V} \\ M = \frac{\langle m \rangle}{V} \\ \chi = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{V}$$

avendo definito :  $m = \sum_i s_i$ ,  $\varepsilon = \frac{\mathcal{H}}{2}$  e  $V = L^2$

### 3 Andamento in funzione della temperatura

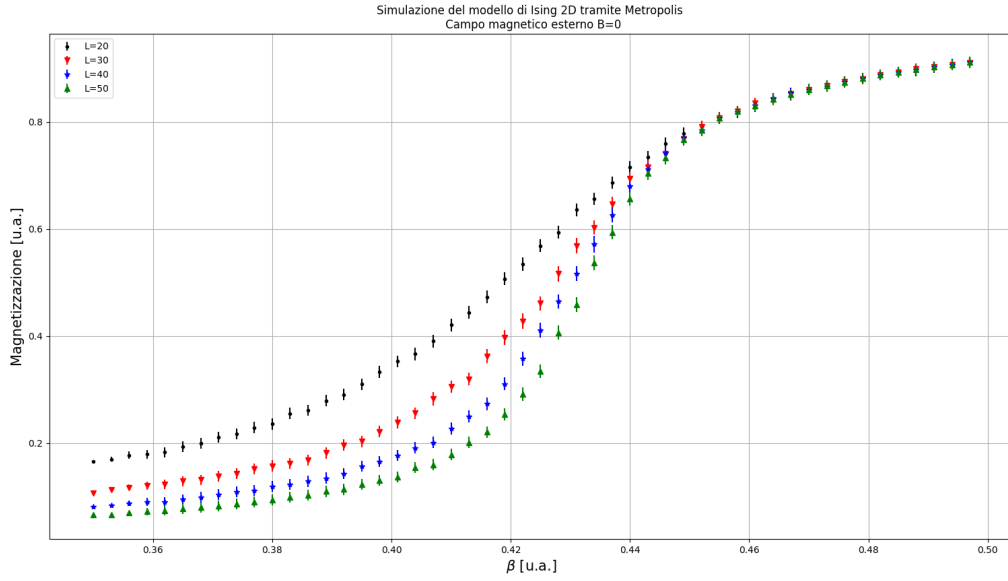


Figura 1: magnetizzazione su vari reticoli

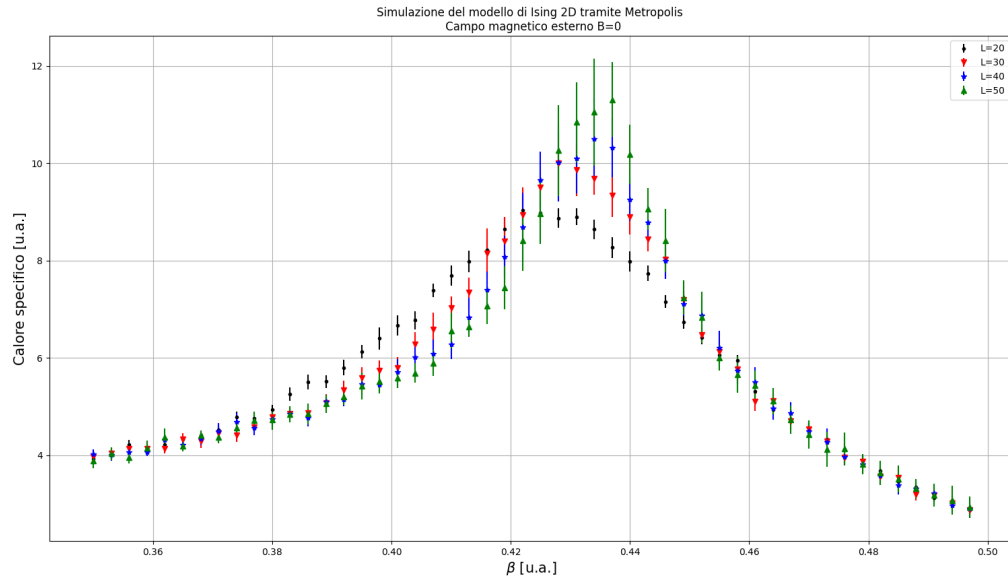


Figura 2: calore specifico su vari reticoli

I grafici mostrano l'andamento delle quantità termodinamiche al variare della temperatura in un intorno del punto critico. Si notano quelli che sono gli effetti di size finito: non c'è nessuna vera divergenza, i massimi della suscettività o del calore specifico non hanno come coordinata  $x$  il beta critico teorico. Questo perché  $\xi$  non può veramente divergere ma è limitato a  $L$  e non siamo al limite termodinamico. Inoltre, la salita della magnetizzazione non è troppo "brusca", come ci si aspetterebbe. Tuttavia, al crescere delle dimensioni del reticolo il massimo della suscettività aumenta e la corrispondente temperatura si avvicina sempre più al valore teorico; anche la magnetizzazione si schiaccia sempre più aumentando la ripidità della salita.

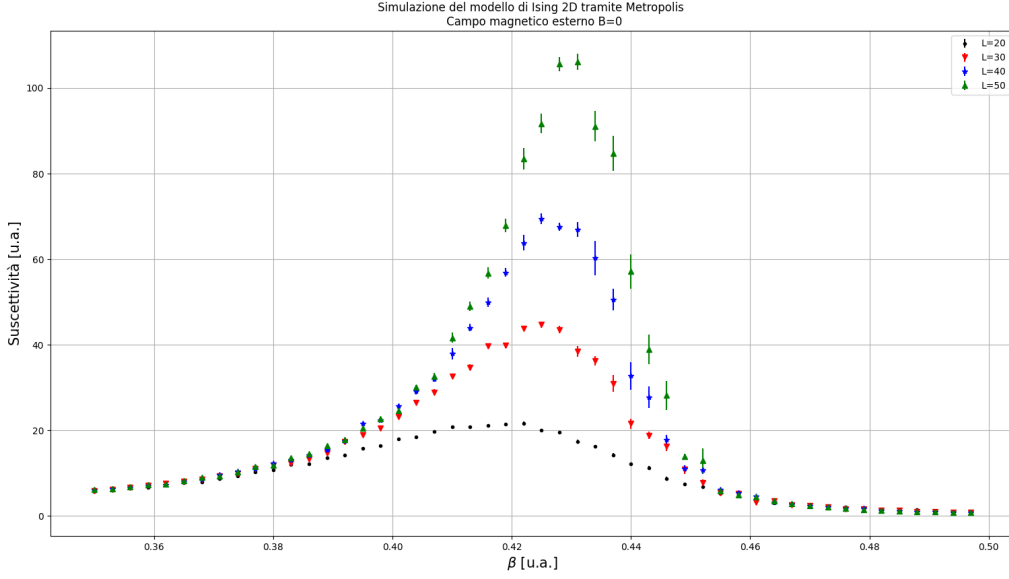


Figura 3: suscettività su vari reticoli

## 4 Stima beta critico

Altra quantità calcolata è il cumulate di Binder definito come:

$$U = \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2}$$

Si nota da figura (4) che il comportamento previsto è rispettato: per valori grandi di  $\beta$  tende ad uno, mentre ad alte temperature tende a tre; inoltre, in questo caso, la stima del cumulante migliora al crescere di  $L$ . Si è notato che le curve al variare della dimensione del reticolo si intersecano in un intorno del punto critico: è stato quindi costruito un grafico che mostrasse in maniera più accurata il range e, considerando la prima intersezione tra le curve e l'ultima, si è stimato graficamente il valore di  $\beta_c$ , che risulta essere:

$$\beta_c = 0.440 \pm 0.003$$

dove l'errore è dato dalla larghezza dell'intervallo, che è compatibile con il valore teorico.

Per vedere la differenza del sistema tra le due fasi della transizione possiamo anche osservare il comportamento della magnetizzazione, figura (5), la quale nella fase ordinata segue una distribuzione che presenta un unico picco, mentre nella fase disordinata abbiamo due picchi che corrispondono alle due possibili polarizzazioni degli spin del reticolo, comportamento che tra l'altro condurrà l'algoritmo a diventare meno efficiente (diventa difficile passare da un picco ad un altro), in quanto vengono a formarsi dei domini di spin, la cui dimensione è data proprio dalla lunghezza di correlazione che sappiamo divergere.

## 5 Stima indici critici

In linea di principio si potrebbe utilizzare per stimare gli indici critici, sia gli andamenti in funzione di  $t$  che di  $\xi$ ; nella pratica l'utilizzo della temperatura ridotta, benché possa riportare risultati che sembrano ragionevolmente vicini ai valori noti, non ci dà sicurezza sul fatto che l'errore sia ben stimato. Questo è dovuto al fatto che a priori non sappiamo quanto vicino metterci al punto critico e quanto deve essere grande l'intervallo considerato; i risultati verranno comunque presentati. Più sicuro è l'utilizzo della lunghezza di correlazione che sappiamo saturare, o il finite size scaling. Va inoltre precisato che il calore specifico presenta delle correzioni logaritmiche non trascurabili e non visibili su piccoli  $L$ , e ciò comporterà problemi nella stima dell'indice critico  $\alpha$ .

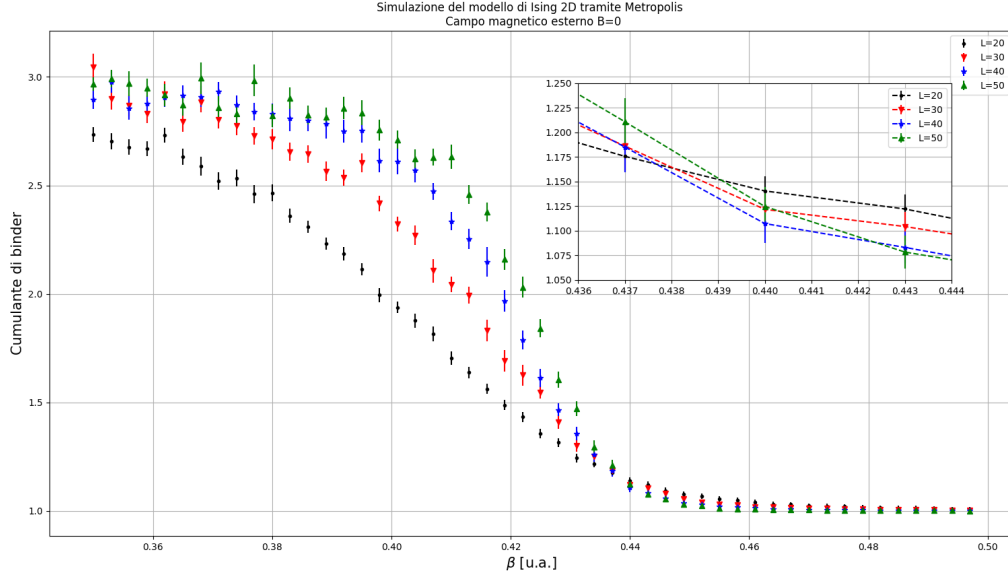


Figura 4: Cumulante di binder su vari reticoli

Comportamento della magnetizzazione reticolo 20X20

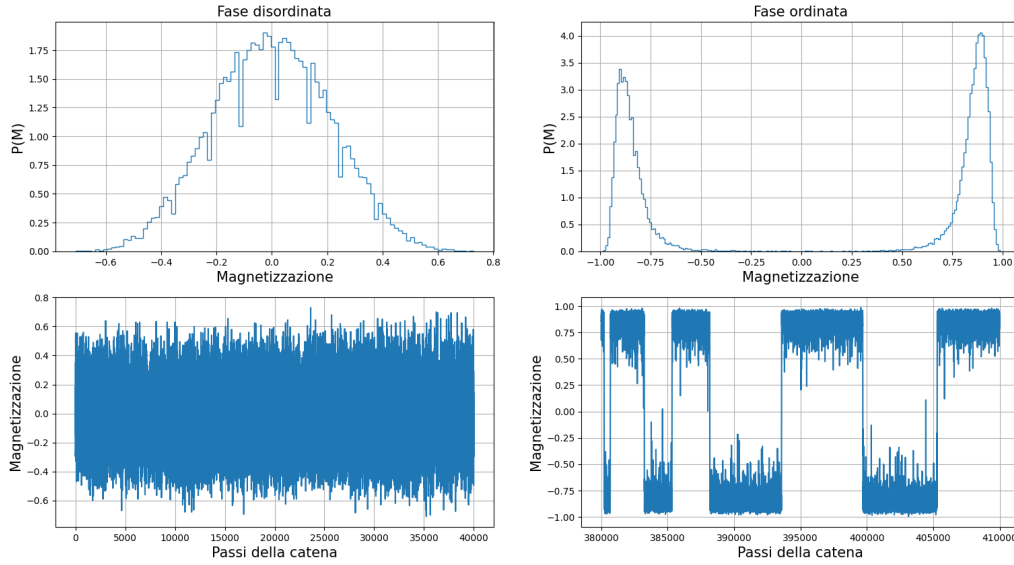


Figura 5: Comportamento del parametro d'ordine nelle due fasi della transizione

## 5.1 Stima di $\alpha$

La teoria prevede che  $\alpha$  sia nullo, e ciò indica quindi un andamento costante. Considerando quindi i massimi del calore specifico al variare della dimensione del reticolo, infatti la  $\xi$  satura ad  $L$ , ed eseguendo un fit con la legge a potenza, visibile in figura(6), si ottiene:

- $m = 4.2 \pm 0.1$
- $\chi^2 / (DOF) = 0.2 / 6 (DOF)$
- $b = 0.255 \pm 0.008$
- $corr(m, b) = -0.99$

per cui il valore di  $\alpha$  non risulta compatibile con la teoria, come si accennava sopra possiamo imputare ciò alle correzioni logaritmiche.

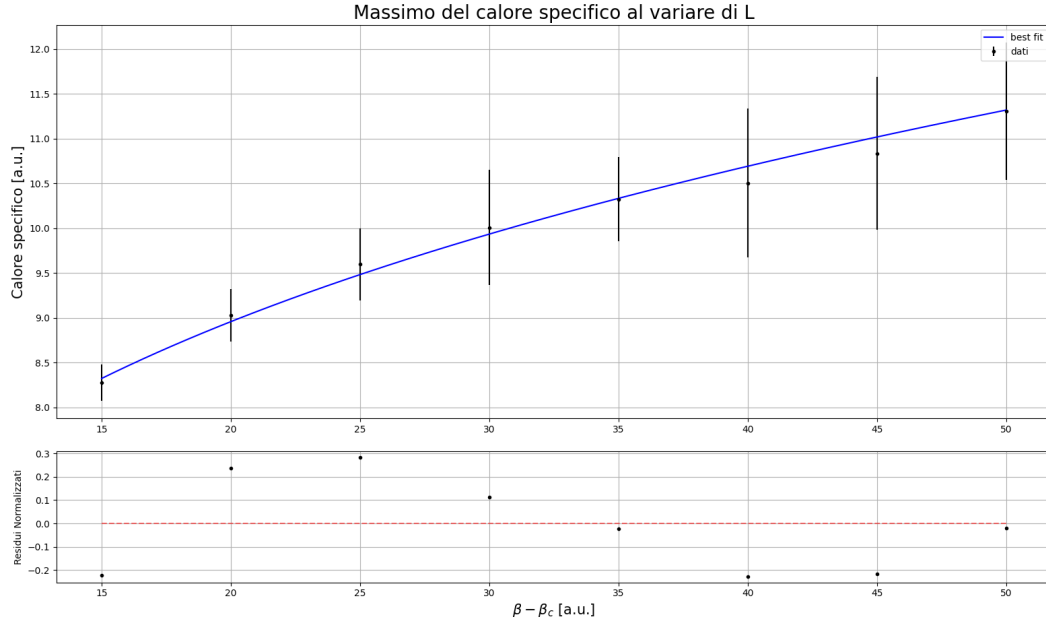


Figura 6: fit calore specifico secondo il modello:  $mL^b$

## 5.2 Stima di $\gamma$ e $\nu$

### 5.2.1 Stima del rapporto

Come detto sopra non si verificano vere divergenze perché  $\xi$  non può divergere ma può arrivare al massimo ad  $L$ , che è la dimensione del reticolo. Si può quindi usare le relazioni precedenti e dire che:

$$\chi_{max} \propto \xi^{\gamma/\nu} \propto L^{\gamma/\nu}$$

e quindi si può tramite un fit dei massimi della suscettività al variare di  $L$  ricavare  $\frac{\gamma}{\nu}$

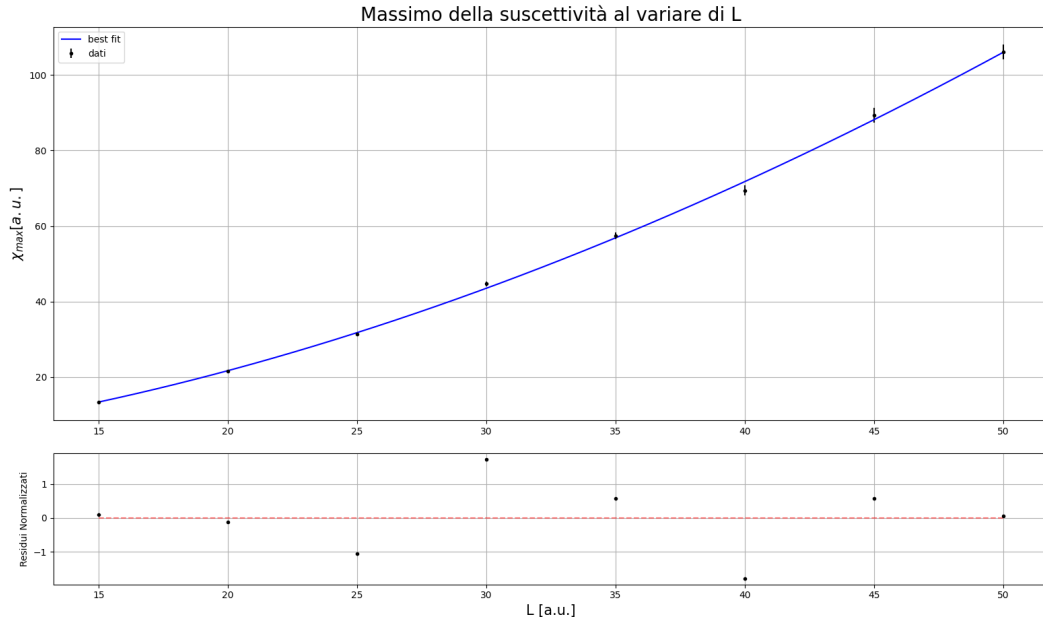


Figura 7: Fit massimi della suscettività secondo il modello :  $m\chi^{\gamma/\nu} + q$

- $m = 0.10 \pm 0.02$
- $\gamma/\nu = 1.76 \pm 0.06$
- $q = 0.8 \pm 0.9$
- $\chi^2 / (DOF) = 8 / 5 (DOF)$
- $corr(m, \gamma/\nu) = -0.99$
- $corr(m, q) = -0.97$
- $corr(\gamma/\nu, q) = 0.96$

In questo caso il valore ottenuto risulta compatibile con quanto predetto dalla teoria.

### 5.2.2 Stima di $\gamma$

Se invece considerando la suscettività andiamo a vedere l'andamento in funzione di  $t$  dopo il picco, usando:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}$$

ed eseguendo un fit con una legge a potenza si ha:

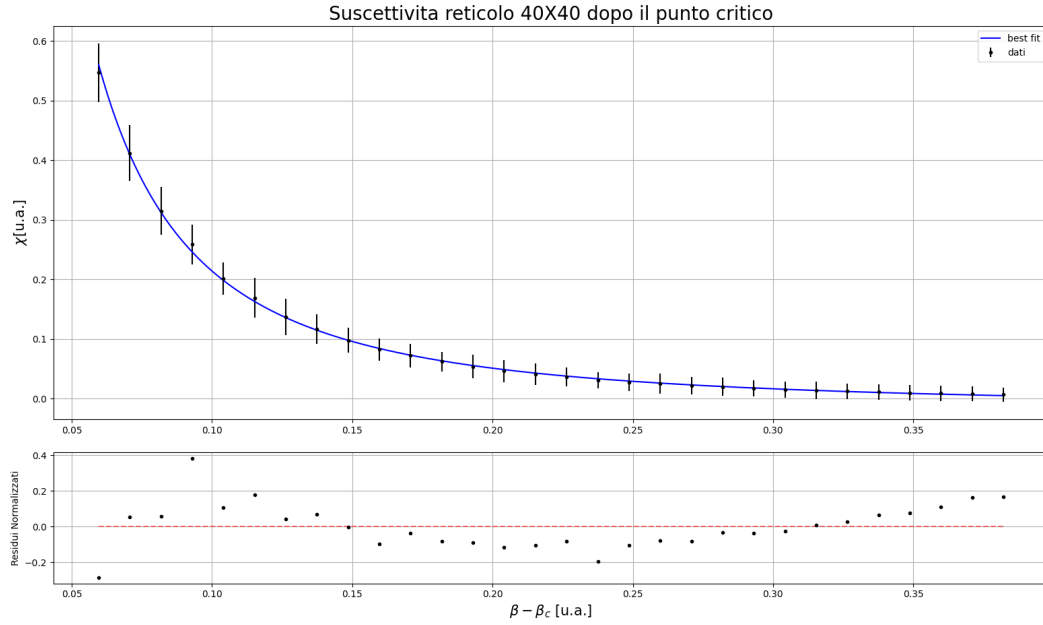


Figura 8: Fit della suscettività secondo il modello :  $mt^\gamma + q$

- $m = 0.0038 \pm 0.0002$
- $\gamma = -1.77 \pm 0.02$
- $q = -0.016 \pm 0.001$
- $\chi^2 / (DOF) = 0.5 / 27 (DOF)$
- $corr(m, \gamma) = 0.99$
- $corr(m, q) = -0.92$
- $corr(\gamma, q) = -0.90$

Per cui alla fine si ottengono i seguenti valori:

$$\gamma = 1.77 \pm 0.02 \quad \nu = 1.00 \pm 0.03$$

compatibili con i valori teorici.

### 5.3 Stima di $\beta$

In una zona non troppo lontana dal punto critico, prima che saturi intorno ad uno la magnetizzazione presenta un andamento della forma:

$$\langle |M| \rangle \sim |t|^\beta$$

In questo caso il fit restituisce i seguenti valori:

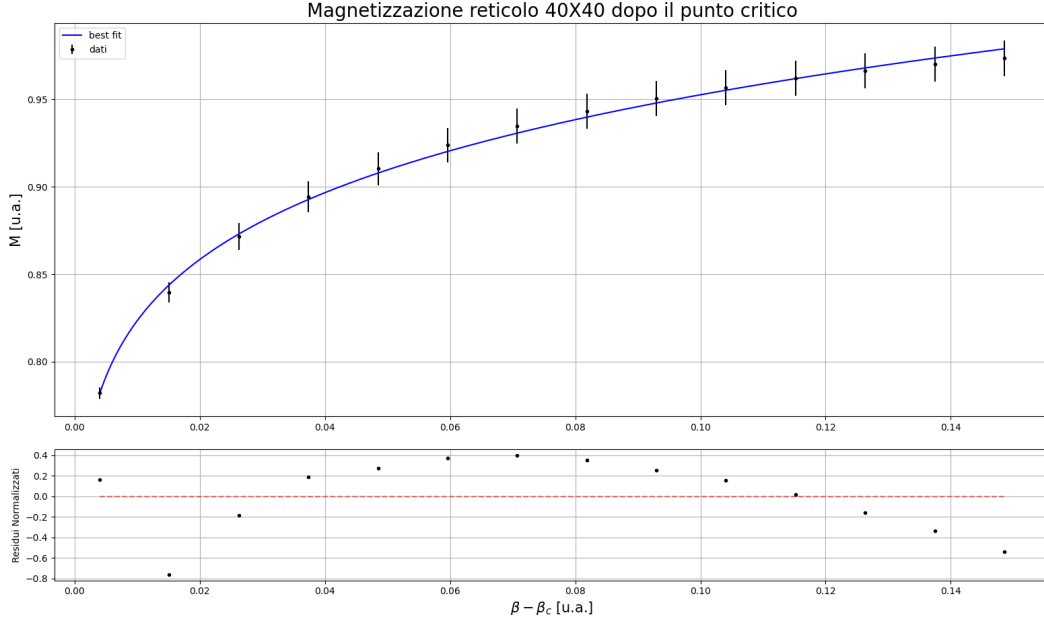


Figura 9: Fit della magnetizzazione secondo il modello :  $mt^\beta + q$

- $m = 0.68 \pm 0.07$
- $\beta = 0.126 \pm 0.023$
- $q = 0.44 \pm 0.08$
- $\chi^2 / (DOF) = 2 / 11 (DOF)$
- $corr(m, \beta) = -0.99$
- $corr(m, q) = -0.99$
- $corr(\beta, q) = 0.99$

Il valore di  $\beta$  è presentato con tre cifre e non con due, come si potrebbe fare poiché il fit restituisce già un errore sulla seconda, per notare che come si è già detto l'affidabilità del metodo; si ottiene infatti che la stima del fit differisce di 0.001 in quanto il valore teorico è 0.125, un ordine di grandezza in meno di quanto restituisce il fit. La stima benché accurata, risulta poco precisa dato il grande errore.

## 6 Finite size scaling

Quanto fatto finora vale in una zona non troppo vicina al punto critico, se si volesse descrivere cosa avviene al punto critico si potrebbe utilizzare il finite size scaling. Si può dire, per una certa quantità termodinamica (e.g.  $\chi$ ):

$$\chi(\beta, L) = \chi(\xi, L) = L^{\gamma/\nu} \phi(\xi, L)$$

poiché sappiamo che  $\xi = \xi(\beta)$ , e sia  $\phi$  una certa funzione che descriva l'andamento intorno al picco che sappiamo essere di altezza  $L^{\gamma/\nu}$ .

Benché il sistema presenti tre lunghezze caratteristiche:  $a$  che è il passo reticolare,  $\xi$  che è ciò che descrive la fisica del sistema ed  $L$  che è la dimensione del reticolo, possiamo, in quanto  $\xi$  sta, teoricamente, divergendo, assumere che il sistema perda memoria della struttura microscopica, per cui anche di  $a$ ; siamo quindi interessati solo al rapporto tra le due restanti lunghezze. Si ha:

$$\chi(\beta, L) = L^{\gamma/\nu} \phi(L/\xi) = L^{\gamma/\nu} \bar{\phi}(L^{1/\nu} t) = L^{\gamma/\nu} \hat{\phi}(L^{1/\nu} (\beta - \beta_c))$$

Si sta quindi dicendo che una quantità, che il linea di principio è funzione di più variabili, deve essere in realtà funzione di una loro opportuna combinazione, che è la variabile di scaling  $x = L^{1/\nu}(\beta - \beta_c)$ , più un fattore moltiplicativo  $L^{\gamma/\nu}$  nella fattispecie.

Si può avere quindi una conferma degli indici critici utilizzando lo scaling, che porterà ad annullare le differenze dovute alla dimensione del reticolo, ottenendo il collasso dei dati su un'unica curva, che altro non sarebbe se non  $\hat{\phi}(x)$ . Riportiamo i risultati per la magnetizzazione e la suscettività poiché a causa delle correzioni logaritmiche del calore specifico il collasso dei dati non si verifica.

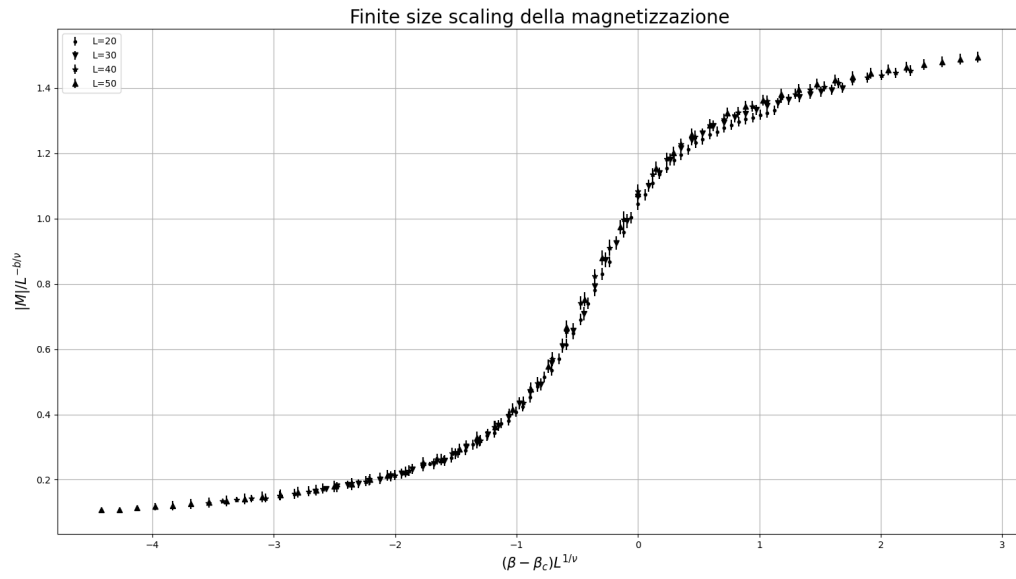


Figura 10: Finite size scaling per la magnetizzazione

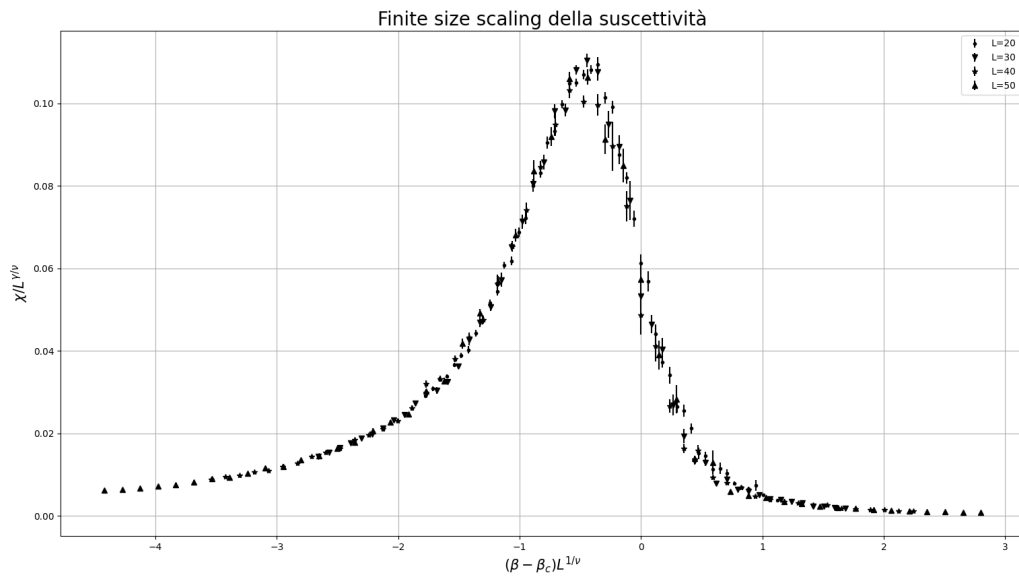


Figura 11: Finite size scaling per la suscettività