Estudiar el modelo de Ising ferromagnético en una red cuadrada de $N = L \times L$ sitios, mediante una simulación Monte Carlo (MC) con el algoritmo de Metropolis. El hamiltoniano de Ising es

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$

donde $\langle i, j\rangle$ significa sumatoria sobre primeros vecinos, $S_i = \pm 1$, tomar $J = 1$ y $k_B = 1$ y emplear condiciones periódicas de contorno.

1. Calcular en función de las iteraciones de MC (10000 pasos de MC por sitio) la energía y la magnetización por sitio ($e = E/N$ y $m = \frac{1}{N}\sum_i S_i$) para $T = 2.5 > T_c$ y $T = 2.1 < T_c$. Tomar como condición inicial el estado ferromagnético ($S_i = +1$) y considerar $L = 10$ y $L = 30$.

2. En las simulaciones que acaba de hacer los nuevos estados son generados modificando los estados previos y por tanto las configuraciones consecutivas están correlacionas. Por esto es muy útil estimar el tiempo de autocorrelación el cual describe la cantidad de pasos de MC necesarios para que dos mediciones no estén correlacionadas. Para lo cual definimos las funciones de correlación temporal $C_A(t)$:

$$C_A(t) = \frac{\langle A(t + t_o)A(t_o)\rangle - \langle A\rangle^2}{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$$

   donde A es el valor de la cantidad A a tiempo t. Los promedios son sobre todos los posibles origenes de tiempo t_o. Debido a que el origen del tiempo es arbitrario para un sistema en equilibrio, C_A solo depende de la diferencia de tiempo t y no depende de t y t_o por separado. Para tiempos suficientemente largos, $A(t)$ y $A(0)$ se descorrelacionan $\langle A(t + t_o)A(t_o)\rangle \to \langle A(t + t_o)\rangle\langle A(t_o)\rangle = \langle A\rangle^2$ y por tanto $C_A \to 0$ cuando $t \to \infty$. $C_A(t = 0)$ está normalizado a 1. En general, $C_A(t)$ decae exponencialmente con t lo que permite definir un tiempo de correlacion τ_A que depende de la cantidad física A y de los parámetros físicos del sistema, como por ejemplo la temperatura. Para L=10 calcule las funciones de autocorrelación C_m y C_e para distintas temperaturas tanto por debajo como por encima de T_c. Para T=2.5 calcule las funciones de autocorrelación C_m para distintos tamaños, $L = 5, 10, 50$ y 100. Estime τ_A en función de temperatura fiteando las curvas a la forma $C_A \sim e^{-t/\tau_A}$. ¿Los tiempos de correlación τ_m y τ_e son comparables?

3. Calcular en función de la temperatura la magnetización media, la susceptibilidad $\chi = N(\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2)/T$, el valor medio de la energía, y el calor

específico $C = N(\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2)/T^2$. Al ir aumentando la temperatura es recomendable utilizar siempre como condición inicial para la nueva temperatura la configuración final de la temperatura previa, esto acelera la llegada a la configuración de equilibrio y ahorra tiempo de cálculo. Los estimados de los valores medios $\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{1}{\Omega}\sum_{\omega=1}^{\Omega} A_\omega$ se calculan sobre el número total de los pasos de MC (Ω) descartando los pasos previos antes de llegar al equilibrio, A_ω es es el valor de la cantidad A en el paso ω. Obtener resultados para distintos tamaños, $L = 10, 20, 30, 50, 100$. Compare sus resultados para χ con $\langle m \rangle$ reemplazado por $\langle |m| \rangle$. ¿Cuál forma de calcular χ da resultados más precisos?

4. Amplificar los resultados anteriores en una zona de temperatura bien cercana a T_c, para $L = 100$ y en ese entorno cercano a T_c, estimar los exponentes críticos de la magnetización $[m \sim (T_c - T)^\beta]$ y de la susceptibilidad $[\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}]$. Comparar con la solución exacta: $k_B T_c/J = \frac{2}{\ln(\sqrt{2}+1)} = 2.2692$, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$ (Lars Onsager, Phys. Rev. **65** 117 (1944)).

5. Como pudo apreciar nuestros estimados de β, γ y T_c están afectados por el tamaño finito del sistema. Esto ocurre porque de acuerdo a la teoría de escaleo de tamaño finito $T_c(L)$ escalea como $T_c(L) - T_c(L = \infty) \sim aL^{-\frac{1}{\nu}}$ donde a y ν son constantes. Estudie la dependencia con L de los resultados de m y χ obtenidos previamente. Grafique $mL^{\frac{\beta}{\nu}}$ y $\chi L^{-\frac{\gamma}{\nu}}$ en función de $L^{\frac{1}{\nu}}(T - T_c)$ para $L = 10, 20, 30, 50, 100$. Utilice los valores exactos, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$ y $\nu = 1$ ¿Qué observa? ¿Por qué?

6. Una manera de determinar con mayor precisión la transición de fase es utilizando el Cumulante de Binder definido como $g = [1 - \frac{\langle m \rangle^4}{3\langle m^2 \rangle^2}]$. Grafique g en función de temperatura para $L = 10, 20, 30, 50, 100$. ¿Cuál es el valor de g a $T = 0$? Note que las curvas se cruzan a un valor de T que es aproximadamente igual a T_c. ¿Cuál es el valor de g en el cruce? ¿Qué se puede concluir acerca de la naturaleza de la transición de fase? Grafique g en función de $L^{\frac{1}{\nu}}(T - T_c)$. ¿Qué observa?

7. Calcular el histograma de la magnetización por sitio $m = \frac{1}{N}\sum_i S_i$ para $T = 2.5 > T_c$ y $T = 2.1 < T_c$ y $L = 10$. Hallar la energía libre efectiva $F_L(m, T) = -T \log P_L(m, T)$ donde $P_L(m, T)$ es el histograma obtenido en cada caso. Estudie la "barrera de energía" $\Delta F = F_L(0, T) - F_L(m_s, T)$ a $T = 2.1 < T_c$, donde $\pm m_s$ es el valor de magnetización más probable. Calcule

la dependencia de ΔF con L, considerando $L = 5, 8, 10, 12, 15$; en el caso de $L = 15$ serán necesarios al menos 100000 pasos de MC en equilibrio.

8. Ahora extienda el modelo de Ising para tener en cuenta la presencia de un campo magnético h

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

Fijar la temperatura en $T = 2.1 < T_c$ y variar el campo h para $-0.075 < h < 0.075$. Calcular en función de h la magnetización media y la susceptibilidad. Obtener resultados para distintos tamaños, $L = 5, 8, 10, 12, 15$. Notar por ejemplo que la susceptibilidad tiene un máximo en $h = 0$ que crece como L^2. (Ver K. Binder, D. Landau, Phys. Rev. B 30, 1477 (1984)).