



Escuela de
Ciencia y Tecnología
ECyT_UNSAM

Alumna: Farfán, Oriana.

Carrera: Ingeniería Biomédica.

Fecha de entrega: 14/06/2021

RESUMEN:

El trabajo se basó en la simulación e implementación del modelo de Ising en dos dimensiones. Se dividió al trabajo en tres partes para una mejor organización:

La primera fue graficar la magnetización en función del tiempo para diferentes temperaturas y ver cómo se comporta según las variaciones de las mismas.

La segunda parte consistió en obtener gráficamente la evolución del modelo de Ising según determinadas temperaturas y ver las diferencias que existen.

Y la última parte fue calcular y graficar algunas cantidades termodinámicas en función de la temperatura; como la energía media, la capacidad calorífica específica y la susceptibilidad del modelo de Ising bidimensional.

En conclusión, el objetivo de este trabajo fue explorar el alcance de los comportamientos que este modelo puede demostrar, como comportamientos relativamente complejos como la transición de fases de un sistema de spines.

INTRODUCCIÓN:

El modelo de Ising es un modelo matemático simple que permite estudiar un sistema de spines (o dipolos magnéticos) interactuantes. El modelo en 2 dimensiones da cuenta de un cambio de fase a baja temperatura, en la cual el sistema se magnetiza.

Estudiaremos el modelo de Ising 2D con condiciones de contorno periódicas, usando dinámica de Monte Carlo, sin campo externo. Consideraremos un sistema de $N = n \times n$ spines, cada uno puede tomar el valor +1 o -1. La energía de este modelo depende de la configuración de los N spines:

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

Donde J es una constante del material (Supondremos $J = 1$), y la suma es sobre los 4 primeros vecinos.

Equilibramos el sistema durante P_{eq} pasos y luego correremos simulaciones durante P pasos. En cada paso, se hacen N intentos de invertir un spin elegido al azar (es decir, en promedio, un intento por spin). La probabilidad de invertir el spin se calcula como $\exp(-\Delta E/k_B T)$, donde ΔE es el cambio de Energía del sistema (que ocurriría si invertimos el spin), k_B es la constante de Boltzmann (podemos suponer que trabajamos en un sistema de unidades donde $k_B = 1$) y T es la temperatura.

Cuando $n \rightarrow \infty$, el modelo tiene una transición de fase continua a la temperatura crítica $T=T_c$, donde $\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \simeq 2.27$

Las variables físicas que se pueden obtener al momento de hacer el estudio de estos materiales son: la magnetización por espín (m), el calor específico (C_v) y la susceptibilidad magnética (χ). Empleando el formalismo de la mecánica estadística se obtiene que la magnetización por espín viene dada por:

$$m = \frac{M}{N} \text{ siendo } M \text{ la magnetización total.}$$

La susceptibilidad en función de la temperatura y viene dada por:

$$\chi = \frac{\text{Var}(M)}{Nk_B T}$$

y el calor específico, que nos dice cuánto cambia la energía con el aumento de temperatura, está determinado por:

$$Cv = \frac{\text{Var}(E)}{k_B T^2}$$

Nota: en el anexo se adjuntan los códigos de Python utilizados para la simulación del modelo de Ising 2D.

MÉTODO Y RESULTADOS:

En la primera parte se obtuvo la gráfica de la magnetización por spin en función del tiempo (número de pasos) para los siguientes valores de la temperatura: $T \in \{1, 2, 4, 6\}$. Se calculó en condiciones periódicas, sin campo magnético y $J=1$.

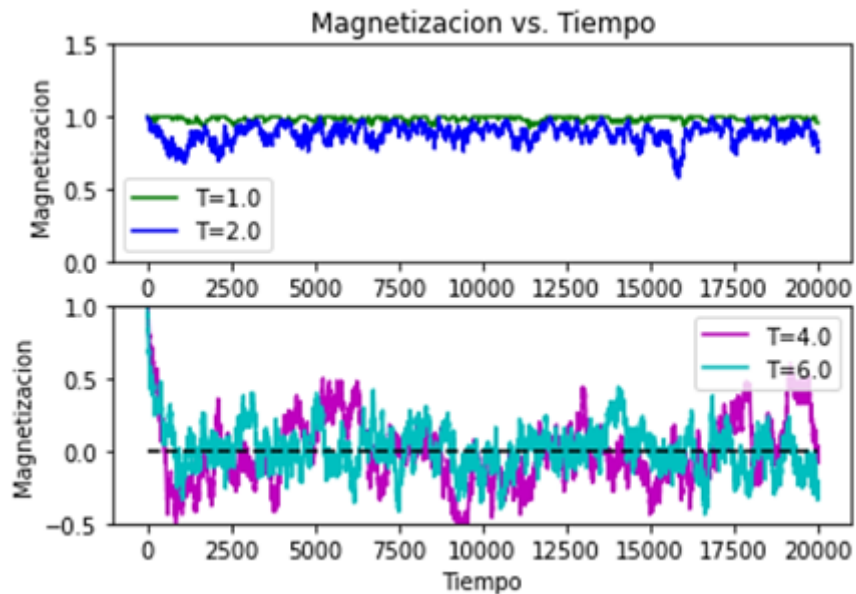


Figura 1: Magnetización en función del tiempo (20000 pasos de tiempo) para diferentes temperaturas (T).

Se realizó el mismo procedimiento para valores de temperatura cercanos a T_c como $T \in \{2.3, 2.4, 2.5\}$

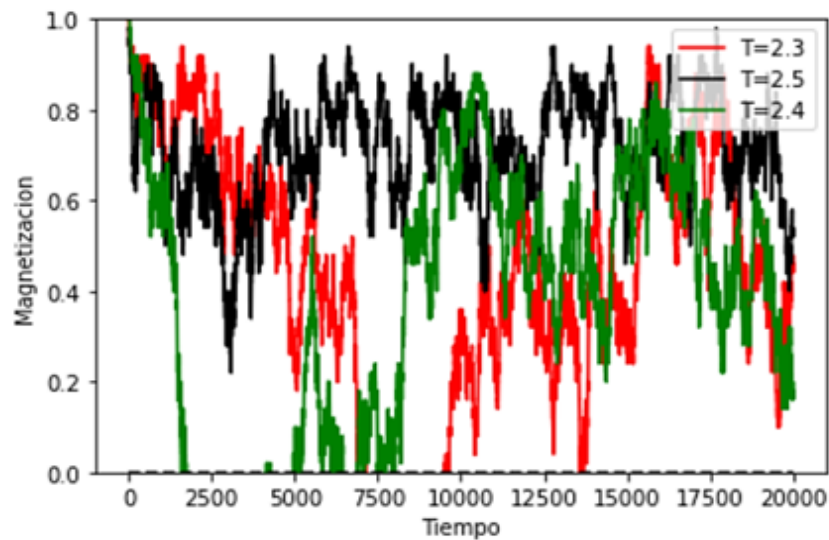


Figura 2: Magnetización en función del tiempo (20000 pasos de tiempo) para temperaturas cercanas a T_c .

En la segunda parte se realizó una simulación para ilustrar el proceso de magnetización, iniciando con una distribución aleatoria de espines (Time=0) que evoluciona por completo para las temperaturas $T \in \{1, 2.5, 6\}$. Se utilizó un tamaño de red de 50x50 y la cantidad de pasos de la simulación fue desde 1 hasta 10000.

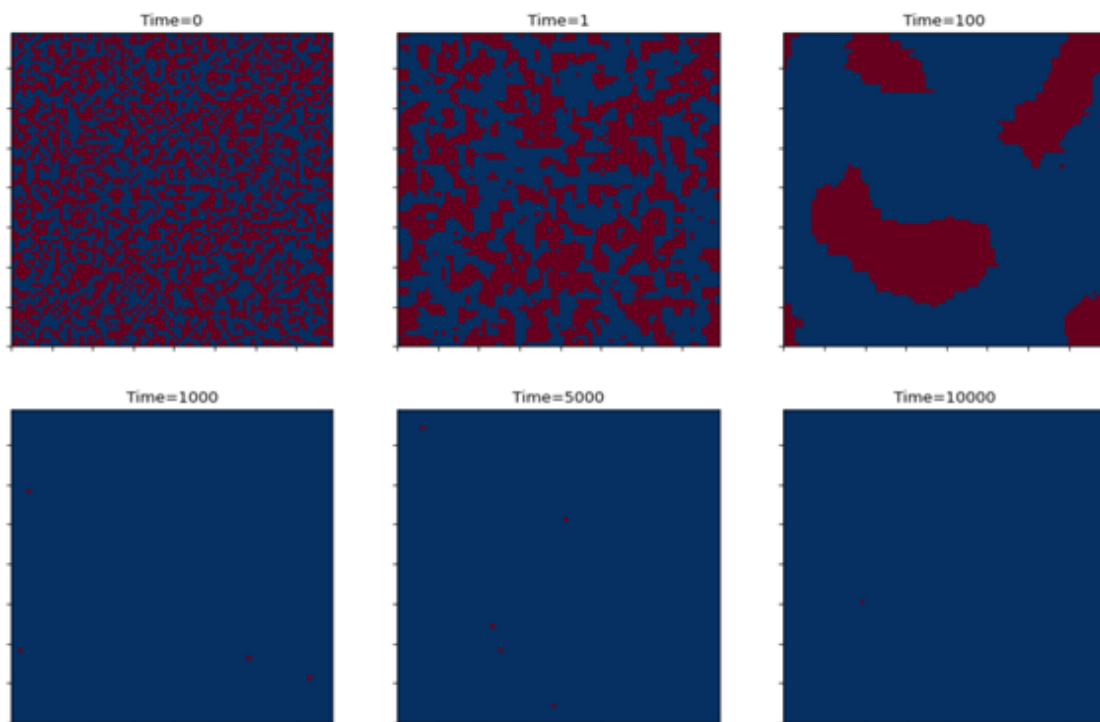


Figura 3: Magnetización para una mapa de spins de 50x50. Cantidad de pasos=[1,10000] a $T=1$.

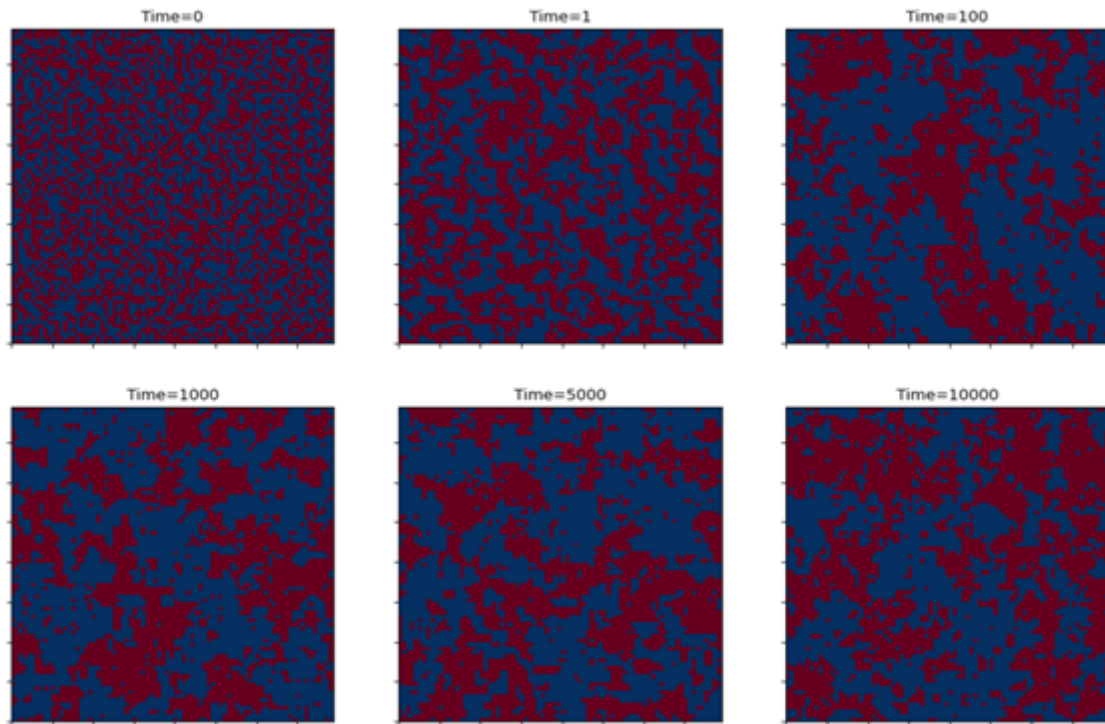


Figura 4: Magnetización para una mapa de spins de 50x50. Cantidad de pasos=[1,10000] a $T=2.5$.

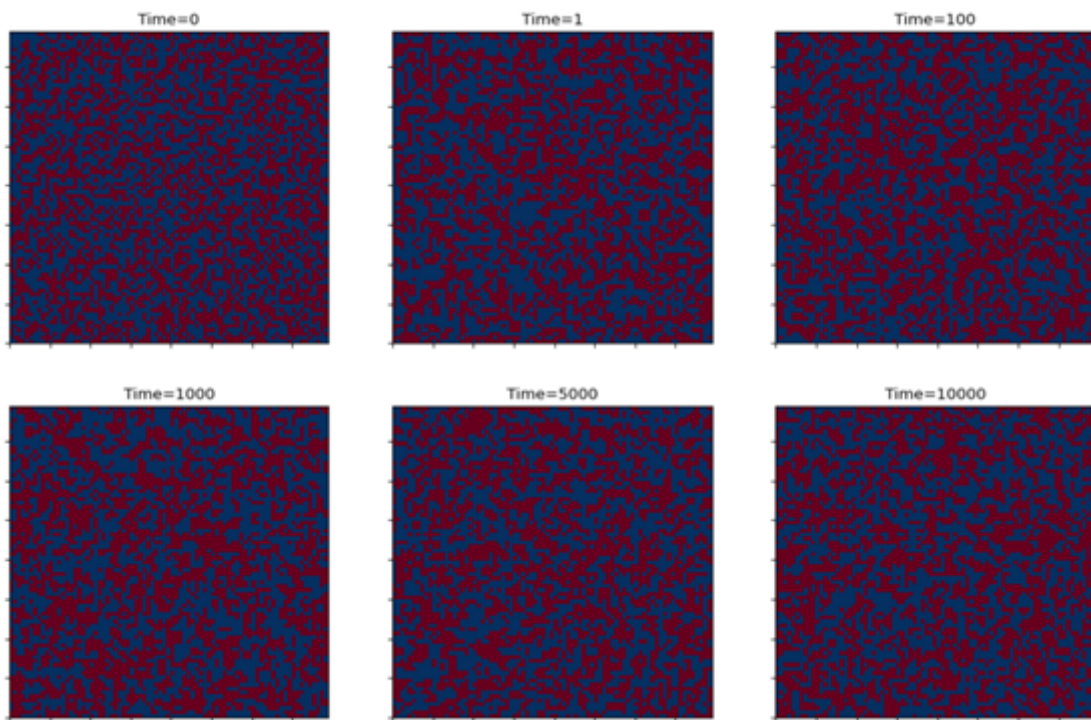


Figura 5: Magnetización para una mapa de spins de 50x50. Cantidad de pasos=[1,10000] a $T=6$.

La tercera parte consistió en obtener los valores de diferentes variables físicas en función de la temperatura. La simulación es también para un tamaño de la red de 50x50, temperaturas entre [0,5] y la cantidad de pasos/iteraciones fue de 10000.

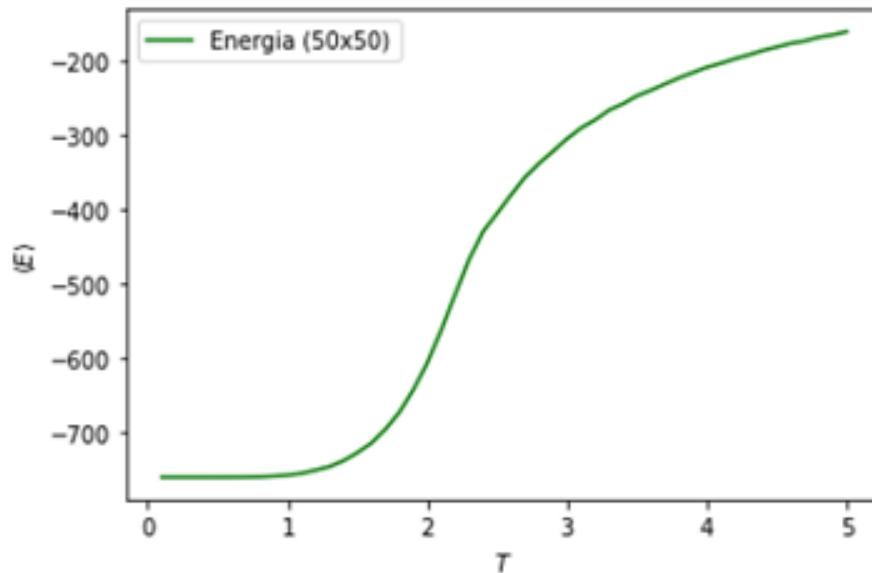


Figura 6: Energía en función de la temperatura.

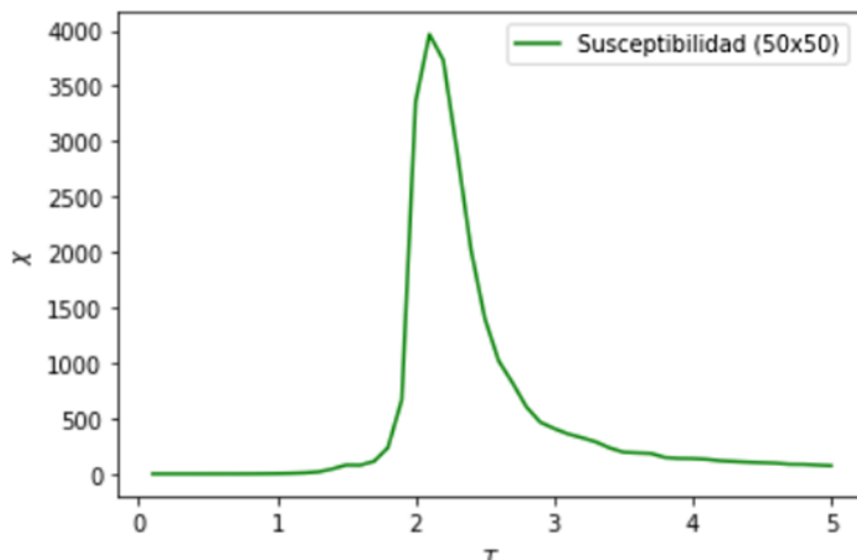


Figura 7: Susceptibilidad magnética en función de la temperatura.

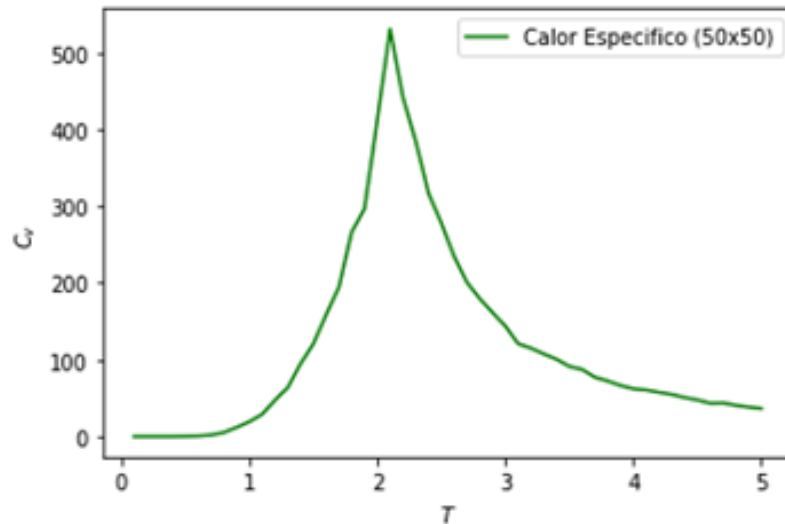


Figura 8: Calor específico en función de la temperatura.

CONCLUSIONES:

Para la primera parte se puede observar de la *figura 1* que para temperaturas por debajo del T_c la magnetización se mantiene en un valor de casi constante de 1. Es un resultado esperado, que consiste en que todos los spines se encuentren alineados a bajas T .

Por otra parte las curvas correspondientes a temperaturas mayores a T_c se dirigieron hacia el valor 0, ya que las fluctuaciones térmicas eliminan la posibilidad de que los spines vecinos consigan alinearse.

En la *figura 2*, donde los valores de temperatura rondan T_c se ve que se tienen las mayores fluctuaciones entre 1 y 0. Esto es porque los valores usados en la simulación son muy cercanos al que produce cambios de fase de ferromagnético a paramagnético.

Entonces si la temperatura aumenta, la magnetización tiende a ir a 0. Si la temperatura es baja la magnetización es 1 casi constante en la simulación. Para valores de temperatura cercanos a T_c hay fluctuaciones entre 1 y 0.

En la segunda parte se observa el proceso de magnetización para cada temperatura de interés. En el caso de $T=1$ se distingue una clara tendencia a magnetizarse por completo a lo largo del tiempo, es decir que el sistema esté representado por solamente un color, en este caso azul en $\text{time}=10000$. Era lo esperado ya que para temperaturas menores a T_c se debería tener un sistema ferromagnético, o sea en ausencia de campo externo y a bajas temperaturas aún hay magnetización.

En $T=6$ se podría decir que en promedio hay la misma cantidad de estados de spines para arriba como para abajo (cada color es uno de esos estados) por lo que la magnetización a cualquier time es cero. Esto significa que las excitaciones térmicas hacen que los espines cambien fácilmente de orientación y haya poca organización en el sistema. Era lo esperado ya que para temperaturas mayores a T_c se debe tener un sistema paramagnético, o sea en ausencia de campo externo y a altas temperaturas no hay magnetización.

En $T=2.5$ (se tomó este valor en vez del verdadero T_c por recomendación) se puede interpretar que no está ni muy desorganizado como $T=6$ ni tampoco tan organizado como

$T=1$. Como era de esperarse en T_c hay una especie de transición de fase, en donde “conviven” los dos estados.

En la tercera parte se obtuvo que en las *figuras 7 y 8*, alrededor del punto T_c , ambas cambian como una ley de potencias. A diferencia con la magnetización este tiene un comportamiento de que se va a infinito en T_c . Esto significa que en C_v o χ cuando se está lejos del punto crítico una pequeña cantidad de temperatura puede producir un cambio de valor razonable. Pero cerca de T_c , pequeñas variaciones de T provocan cambios grandes en la cantidad de calor intercambiado del sistema con el medio.

En la *figura 6* que corresponde a la energía se ve que la energía del spin crece con la temperatura y que alrededor de T_c la energía se incrementa al máximo ya que se tiene una inflexión en la sigmoidea. El punto de inflexión de la sigmoidea coincide con los picos de C_v y χ .

ANEXO:

Se adjuntan los códigos utilizados para este trabajo.

<https://drive.google.com/drive/folders/1PDy9RiBEWYCuFLAHzl1QOGQHqaHnmc3O?usp=sharing>