

# Simulació numèrica del model d'Ising en 2D

Claudia Nuñez

*Facultat de Física, Universitat de Barcelona, Diagonal 645, 08028 Barcelona.*

**Resum:** L'objectiu d'aquesta pràctica és la resolució del model d'Ising en 2D, emprant un algorisme Metropolis. S'ha estudiat el comportament del sistema simulat per a diverses mides i temperatures, observant l'aparició d'una transició de fase contínua entre una fase ferromagnètica a baixes temperatures i una fase paramagnètica a temperatura més elevada. A més, s'ha estudiat el comportament pseudocrític del sistema per a mides finites i, realitzant una extrapolació al límit termodinàmic, s'ha estudiat el comportament crític. Els valors dels exponents crítics obtinguts s'apropen als valors teòrics, tot i no ser tots compatibles estadísticament.

## I. INTRODUCCIÓ

El model d'Ising és un model reticular que permet estudiar el comportament de sistemes ferromagnètics, representant-los en una xarxa de spins. En 2 dimensions es coneix la solució exacta i l'existència d'una transició de fase a  $T_C = 2,269K$ .

En aquesta pràctica s'ha estudiat el comportament de sistemes ferromagnètics en dos dimensions. Per a resoldre el model d'Ising de forma numèrica s'ha emprat l'algorisme Metropolis, programat en Fortran77, que, per a una temperatura concreta, explora l'espai de les fases per trobar la solució de configuracions de spins que minimitza l'energia.

En aquest informe s'analitzen els resultats d'aquest estudi, seguint una estructura de tres blocs: introducció teòrica, resultats obtinguts i conclusions.

A la introducció teòrica es tracta el model d'Ising i s'explica l'algorisme que s'ha implementat: l'algorisme Metropolis, que forma part dels mètodes Monte Carlo.

Tot seguit, es presenten els resultats obtinguts i s'analitzen. Primer es tracta l'evolució del sistema al llarg de l'algorisme, per a una mida concreta (32x32) i diversos valors de temperatura al voltant de la temperatura crítica. Per a aquesta mateixa mida, s'analitza la variació de l'estat del sistema amb la temperatura, emprant els valors de l'energia, la imantació, la capacitat calorífica i la susceptibilitat magnètica. Un cop analitzat el comportament del sistema, s'ha variat la mida des de 8 fins a 64 i s'ha estudiat els efectes d'aquesta variació en el comportament del sistema, analitzant els canvis en les variables esmentades. Finalment, estudiant la dependència en la mida del sistema i extrapolant els resultats a un sistema de mida infinita, s'ha estimat la temperatura crítica i s'ha calculat el valor dels exponents crítics. Un cop analitzats els resultats, es comparen amb els valors teòrics i es presenten les conclusions.

Cal remarcar que a l'hora de computar no es pot definir una xarxa infinita. Per mitigar els efectes de contorn s'han fet servir condicions periòdiques de contorn: s'ha simulat una xarxa infinita però periòdica, definint-la amb una geometria toroïdal.

## II. MODEL D'ISING

El model d'Ising és una simplificació del model de Heisenberg, on es considera que el material presenta una forta anisotropia uniaxial a l'eix z, absència de camp extern aplicat i interaccions entre els àtoms restringides als primers veïns en la xarxa. D'aquesta manera, el Hamiltonià del sistema es redueix a la interacció deguda a l'acoblament del moment angular de spin entre àtoms veïns i l'spin presenta només component z. Aquest Hamiltonià pren la forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \quad (1)$$

on el sumatori es realitza sobre els primers veïns i  $J$  és una constant que dona compte de l'energia d'interacció entre spins. La variable de spin pot prendre els valors  $+1$  (up) o  $-1$  (down).

En el cas ferromagnètic el valor de  $J$  és positiu (els spins tendeixen a orientar-se paral·lelament).

Per simplificar els càlculs, al llarg d'aquest estudi s'ha treballat amb unitats reduïdes

$$\mathcal{H}^* = \frac{\mathcal{H}}{J} \quad T^* = \frac{k_B T}{J}, \quad (2)$$

de manera que les quantitats obtingudes són adimensionals. En la fórmula anterior,  $T$  és la temperatura i  $k_B$  la constant de Boltzmann.

En el model en 2 dimensions es pot calcular la solució exacta del sistema, on es detecta l'existència d'una transició de fase contínua a  $T_C = 2,269K$ , entre una fase ferromagnètica a temperatures inferiors a  $T_C$  i una paramagnètica a temperatures superiors. El paràmetre d'ordre que dona compte d'aquest comportament és la imantació per partícula,

$$m = \frac{M}{N} = \frac{1}{N} \sum_i S_i, \quad (3)$$

on  $N$  és el nom de partícules (nussos a la xarxa) i  $M$  la imantació del sistema.

La transició de fase ferromagnètica es pot caracteritzar amb els exponents crítics:

Exponent	$\nu$	$\alpha$	$\gamma$	$\beta$	$\delta$
Valor	1	0	7/4	1/8	15

Que s'obtenen a partir de:

$$\xi \propto |T - T_C|^{-\nu} \quad C_v \propto |T - T_C|^{-\alpha} \quad \chi \propto |T - T_C|^{-\gamma}$$

$$m \propto \begin{cases} |T - T_C|^\beta, & T < T_C \\ |H - H_C|^{\frac{1}{\beta}}, & T = T_C \end{cases} \quad (4)$$

on  $\xi$  és la longitud de correlació,  $C_v$  la capacitat calorífica,  $\chi$  la susceptibilitat magnètica i  $H$  el camp magnètic extern. El símbol de proporcionalitat dona compte de la omisió d'un factor constant que multiplica cada expressió.

Cal tenir en compte que els sistemes finits no presenten un comportament crític. El que s'observa són comportaments pseudocrítics a una temperatura que depèn de la mida del sistema

$$T_{CL} = T_C + DL^{-\frac{1}{\nu}}, \quad (5)$$

amb  $D$  constant. Per a obtenir el comportament crític, s'ha d'extrapolar els resultats obtinguts al límit termodinàmic, a un sistema de mida infinita. Com  $T_{CL}$  és lineal amb la temperatura crítica en el límit termodinàmic, aquesta darrera es pot obtenir a partir de l'estudi de la temperatura crítica per a sistemes finits de diverses mides.

### III. DESCRIPCIÓ DEL ALGORISME

L'algorisme de Metropolis és un mètode de Monte Carlo que utilitza cadenes de Markov. Això vol dir que és un mètode numèric que fa servir nombres aleatoris i explora l'espai de les fases mitjançant un procés estocàstic (cadena de Markov), on les transicions d'un estat a un altre són estadísticament independents. Es descriu de la manera següent:

1. Es genera una matriu inicial amb valors aleatoris de spin. Per a generar nombres aleatoris uniformes molt descorrelacionats s'ha emprat la tècnica Mersenne Twister.
2. Es proposa un canvi de signe d'un spin a l'atzar.
3. Es calcula la diferència d'energia entre el nou estat i l'estat inicial.
4. Si el canvi disminueix l'energia del sistema s'accepta. Si l'augmenta, es genera un nombre aleatori uniforme  $q$  i s'aplica:
  - Si  $q < \exp \frac{\Delta \mathcal{H}}{k_B T}$ , acceptem el canvi.
  - Si  $q > \exp \frac{\Delta \mathcal{H}}{k_B T}$ , rebutgem el canvi.

5. Es torna al pas 2.

Una passa de Monte Carlo correspon a  $N$  propostes de canvi de spin, on  $N$  és la mida del sistema. La cadena de Markov es genera a partir de les passes successives Monte Carlo realitzades per l'algorisme.

Per fer promitjos i que les estimacions dels errors siguin correctes necessitem que les configuracions obtingudes amb l'algorisme siguin estadísticament independents. S'han de considerar diversos factors.

D'una banda, la cadena de Markov presenta fortes correlacions temporals entre configuracions successives i amb l'estat inicial durant les primeres passes de Monte Carlo. S'han mitigat els efectes d'aquestes correlacions no considerant les 2000 primeres passes i calculant les variables d'interès només per a les passes múltiples de 20.

D'altra banda, l'espai de les fases es troba dividit en dues fases separades per una barrera energètica molt difícil de saltar. Són les fases simètriques  $m > 0$  i  $m < 0$ . Per explorar tot l'espai, i no haver d'emprar un nombre molt gran de passes, s'han realitzat promitjos sobre diferents estats inicials aleatoris. D'aquesta manera, estadísticament la probabilitat d'iniciar la cadena de Markov en un costat o l'altre de la barrera de potencial és igual a 0.5. Per a cada temperatura s'ha realitzat el promig entre 200 configuracions inicials diferents.

Així doncs, les dades obtingudes per a cada temperatura i mida del sistema corresponen al promig entre 200 configuracions inicials diferents, per les que s'han realitzat 40000 passes Monte Carlo. D'aquestes, s'han descartat les 2000 primeres i s'han escollit aquelles que corresponien a un múltiple de 20, seleccionant així 19000 valors per a cada configuració inicial.

En els següents apartats s'analitzen les dades obtingudes amb aquesta simulació.

### IV. EVOLUCIÓ DEL SISTEMA

S'estudia ara com evoluciona l'estat del sistema al llarg de l'algorisme, analitzant l'evolució de la imantació i l'energia per partícula. L'objectiu és observar com varia l'estat del sistema amb la temperatura i la influència de les correlacions esmentades en l'apartat anterior. També s'estudia la variació de l'estat del sistema en funció de la llavor emprada per a inicialitzar el generador de nombres aleatoris.

Amb aquesta finalitat, s'han recollit dades per a un nombre de passes igual a 10000, recollint dades per a totes les passes. Les dades corresponen per a un sistema de mida  $32 \times 32$  i diverses temperatures al voltant de la temperatura crítica.

A la figura 1 es pot observar com varia l'energia per partícula en funció de la temperatura i el nombre de passes Monte Carlo.

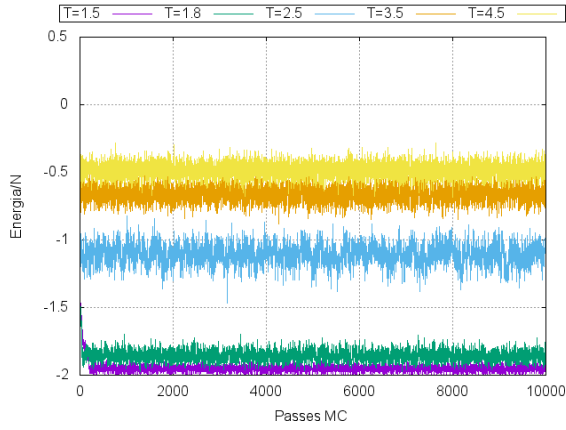


FIG. 1: Evolució de l'energia per partícula del sistema al llarg de l'algorisme per a un nombre de passes  $P = 10000$ . Dades ver a diversos valors de la temperatura i mida  $32 \times 32$ .

Si ens fixem en els diferents valors de temperatura, es distingeixen clarament dues fases. La primera fase apareix a temperatures baixes i el sistema presenta una energia per partícula al voltant de -2. Correspon a la fase ferromagnètica, amb tots els spins ordenats paral·lelament. L'altra, s'observa a temperatures més elevades i el sistema presenta una energia per partícula al voltant de 0. És la fase paramagnètica, on els spins es troben orientats a l'atzar. La transició de fase té lloc per a un valor de la temperatura en l'interval 1.8-2.5.

Per a temperatures baixes, observem que el valor de la energia triga un cert nombre de passes Monte Carlo en establitzar-se.

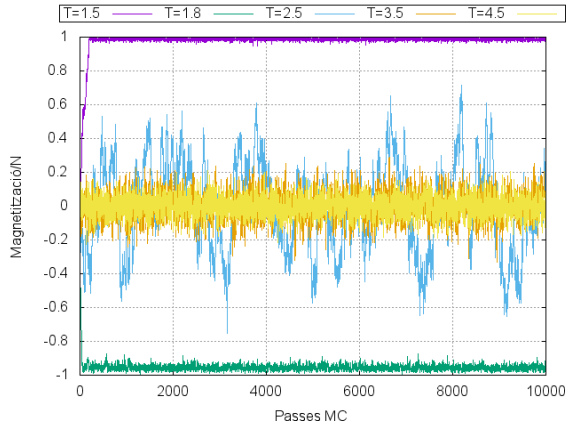


FIG. 2: Evolució de la imantació per partícula del sistema al llarg de l'algorisme per a un nombre de passes  $P = 10000$ . Dades ver a diversos valors de la temperatura i mida  $32 \times 32$ .

Per a la imantació per partícula, s'observa un comportament similar en funció de la temperatura. Es distingeixen la fase ferromagnètica, amb tots els spins alineats, per a temperatures baixes i la paramagnètica per a temperatures més elevades.

En aquest cas, trobem que en la fase ferromagnètica

la imantació pren valors al voltant de 1 (tots els spins orientats up) o -1 (tots els spins orientats down). En la fase paramagnètica el valor de la imantació per partícula oscil·la al voltant de 0, resultat consistent amb un estat on els spins estan orientats a l'atzar. Aquests resultats indiquen que la temperatura crítica es troba entre 1.8 i 2.5, com havíem vist en la gràfica de l'energia.

A més, tornem a observar que per a temperatures baixes el valor de la imantació triga un cert nombre de passes a establitzar-se.

Seguidament es presenten els gràfics de l'evolució per a diversos valors de la llavor, per a una temperatura de 1.8. És a dir, pel cas on el sistema es troba a la fase ferromagnètica.

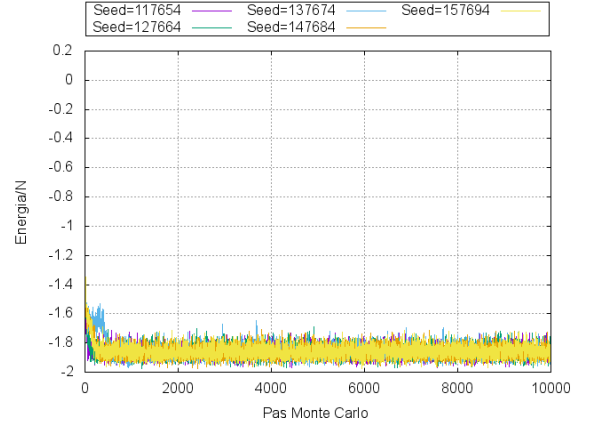


FIG. 3: Evolució de la energia per partícula del sistema al llarg de l'algorisme per a un nombre de passes  $P = 10000$ . Dades ver a diversos valors de la llavor emprada per generar els nombres aleatòris,  $T=1.8$  i mida  $32 \times 32$ .

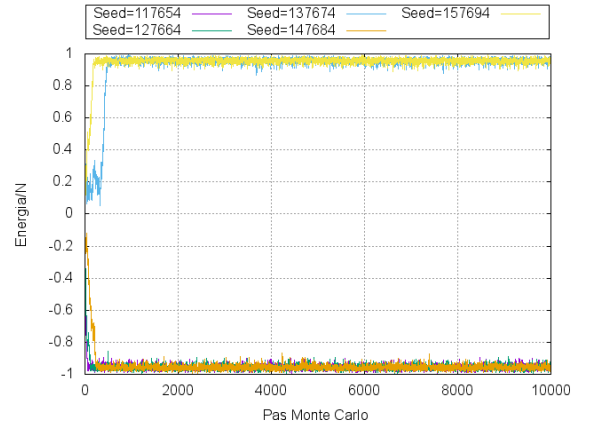


FIG. 4: Evolució de la imantació per partícula del sistema al llarg de l'algorisme per a un nombre de passes  $P = 10000$ . Dades ver a diversos valors de la llavor emprada per generar els nombres aleatòris,  $T=1.8$  i mida  $32 \times 32$ .

En ambdues gràfiques s'observa que tant el valor de l'energia per partícula com la imantació per partícula triguen un cert nombre de passes en establitzar-se. Po-

dem veure que aquest valor depen de la llavor emprada, per tant cal saltar un nombre de passes inicials prou gran per a garantir que els valors que obtenim no presenten correlacions amb l'estat inicial del sistema.

D'altra banda, s'observa que en cas de la imantació hi ha dues fases ferromagnètiques ben diferenciades ( $m > 0$  i  $m < 0$ ) i que l'algorisme arriba a un estat del sistema que es troba en una o l'altra depenent del valor de la llavor (estat inicial del sistema).

## V. COMPORTAMENT DEL SISTEMA $L=32$

En aquest apartat s'estudia el comportament del sistema de mida  $L=32$  en funció de la temperatura a prop del punt crític. S'ha promitjat sobre 38000 configuracions per a cada temperatura.

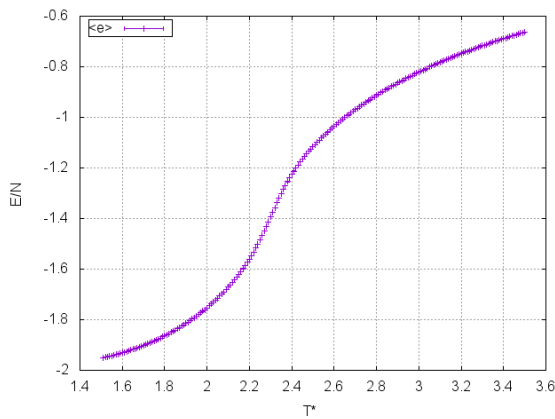


FIG. 5: Energia mitjana per partícula en funció de la temperatura, per a un sistema de mida  $32 \times 32$ . Les barres d'error corresponen a l'error introduït pel mètode Monte Carlo.

L'energia mitjana presenta un valor igual a -2 per a temperatures baixes, que va augmentant i tendeix a 0 a mesura que s'augmenta la temperatura. També presenta un punt d'inflexió a una temperatura propera a 2.3, que correspon a la temperatura pseudocrítica per a aquest sistema finit.

A la gràfica també es mostra l'error associat al mètode Monte Carlo emprat a l'algorisme,

$$\epsilon_e = \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}}{\sqrt{\text{SUM}}}, \quad (6)$$

on SUM correspon al nombre de configuracions independents promitjades en el càlcul de l'energia mitjana i  $N$  és la mida del sistema ( $32 \times 32$ ).

Per estudiar la imantació per partícula mitjana s'ha de tenir en compte que, per a la fase ferromagnètica, aquesta pot prendre els valors  $\pm 1$ . El sistema presenta dues fases simètriques per a  $m > 0$  i  $m < 0$ . En promitjar sobre diverses configuracions s'ha de promitjar sobre el valor absolut de la imantació, o sobre l'arrel quadrada del quadrat de la imantació, perquè aquest no sigui 0. Per

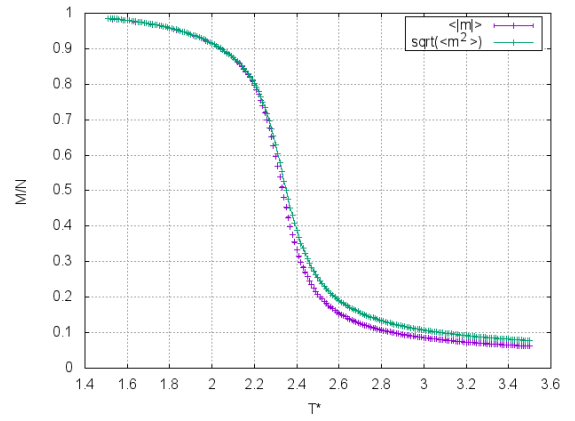


FIG. 6: Imantació en valor absolut mitjana per partícula i arrel de la imantació al quadrat, en funció de la temperatura, per a un sistema de mida  $32 \times 32$ . Les barres d'error corresponen a l'error introduït pel mètode Monte Carlo.

aquest motiu, a la figura 6 s'observa l'evolució d'aquests dos valors mitjans respecte de la temperatura.

La imantació en valor absolut és igual a 1 per a temperatures baixes i disminueix a mida que disminueix la temperatura, tendint a 0. Les dues corbes presenten un punt d'inflexió a una temperatura prop de 2.3, com en el cas de l'energia. La imantació correspon al paràmetre d'ordre del sistema, per tant s'espera que en el límit termodinàmic s'anuli a la temperatura crítica.

L'error associat al mètode Monte Carlo s'ha calculat a partir de:

$$\epsilon_m = \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2}}{\sqrt{\text{SUM}}}. \quad (7)$$

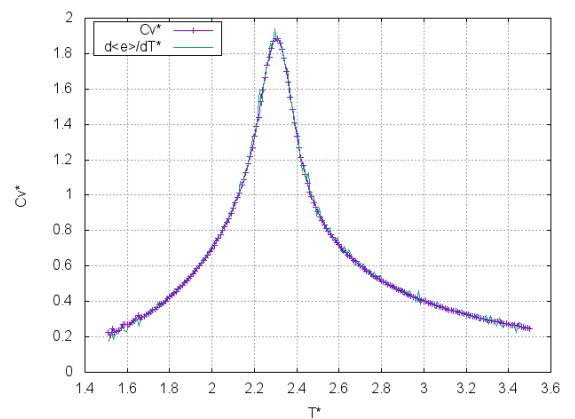


FIG. 7: Capacitat calorífica i derivada de l'energia mitjana per partícula respecte a la temperatura, en funció de la temperatura, per a un sistema de mida  $32 \times 32$ . Les barres d'error corresponen a l'error introduït pel mètode Monte Carlo.

A partir de les fluctuacions en l'energia i la imantació del sistema s'han calculat la capacitat calorífica i la sus-

ceptibilitat magnètica, respectivament,

$$C_v^* = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2} \quad \chi^* = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2}{T}. \quad (8)$$

La capacitat calorífica s'ha mesurat a partir de les fluctuacions de l'energia (8) i com a la derivada de l'energia per partícula mitjana respecte a la temperatura. Com s'observa a la figura 7, els valors de la derivada mostren un comportament molt semblant, tot i presentar certes fluctuacions.

Tant la capacitat calorífica com la susceptibilitat magnètica mostren un comportament en forma de campana, amb un pic per a una temperatura propera a 2.3.

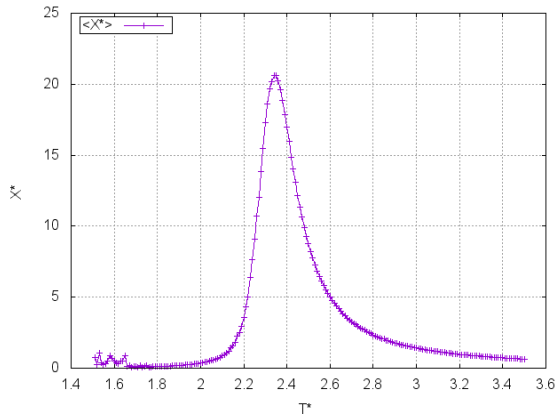


FIG. 8: Susceptibilitat magnètica en funció de la temperatura, per a un sistema de mida 32x32. Les barres d'error corresponen a l'error introduït pel mètode Monte Carlo.

## VI. EFECTES DE VARIAR LA MIDA DEL SISTEMA

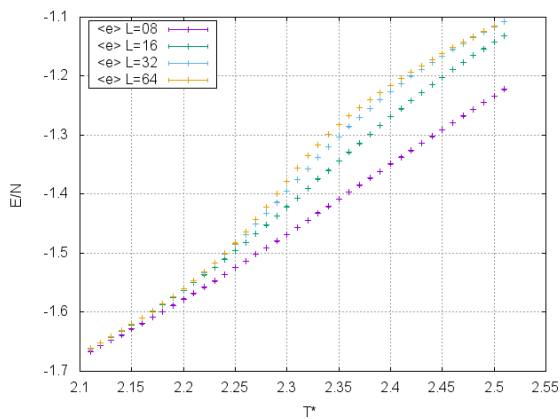


FIG. 9: Energia mitjana per partícula en funció de la temperatura, per a sistemes amb L=8,16,32 i 64. Les barres d'error corresponen a l'error introduït pel mètode Monte Carlo.

En aquest apartat s'estudia l'efecte en la variació de la mida del sistema. L'objectiu és aconseguir extrapolar les dades del nostre sistema al límit termodinàmic ( $L \rightarrow \infty$ ).

S'analitzen els casos de L=8, 16, 32 i 64, augmentant la mida en potències de 2. L'anàlisi és equivalent al de l'apartat anterior, amb l'excepció del rang de temperatures escollit s'ha reduït a l'interval comprès entre 2.1 i 2.5, degut a que la simulació per a la mida L=64 és molt costosa. D'aquesta manera també s'observa millor a les gràfiques el comportament dels extrems.

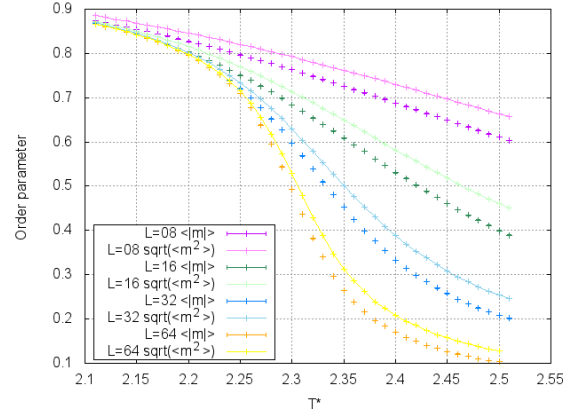


FIG. 10: Imantació en valor absolut mitjana per partícula i arrel de la imantació al quadrat, en funció de la temperatura, per a sistemes amb L=8,16,32 i 64. Les barres d'error corresponen a l'error introduït pel mètode Monte Carlo.

A les gràfiques de l'energia i la imantació es pot observar com els sistemes presenten un comportament similar per a temperatures baixes però, a mesura que augmenta la mida del sistema, el canvi en augmentar la temperatura es torna més pronunciat i el punt d'inflexió es va desplaçant cap a temperatures més baixes.

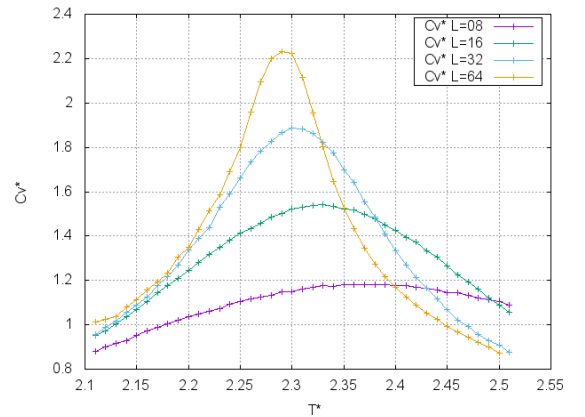


FIG. 11: Capacitat calorífica respecte a la temperatura, en funció de la temperatura, per a sistemes amb L=8,16,32 i 64. Les barres d'error corresponen a l'error introduït pel mètode Monte Carlo.

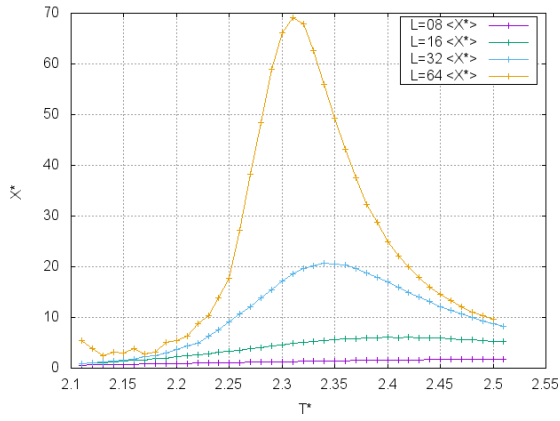


FIG. 12: Susceptibilitat magnètica en funció de la temperatura, per a sistemes amb  $L=8, 16, 32$  i  $64$ . Les barres d'error corresponen a l'error introduït pel mètode Monte Carlo.

En el cas de la capacitat calorífica i la susceptibilitat magnètica s'observa una variació similar. A mesura que la mida del sistema augmenta la forma de campana és més pronunciada amb el màxim en un valor més elevat. En el límit termodinàmic aquestes quantitats divergiràn. També s'observa com el màxim es desplaça cap a l'esquerra a mesura que la mida del sistema augmenta.

El comportament observat en aquesta comparativa dona compte de què, com s'ha esmentat anteriorment, per a una mida finita del sistema no s'observa un comportament crític si no un comportament pseudocrític, amb una  $T_{CL}$  (5) que depèn de la mida del sistema.

## VII. DETERMINACIÓ DE LA TEMPERATURA CRÍTICA

Per a obtenir el comportament crític del sistema cal realitzar la extrapolació de les dades a  $L \rightarrow \infty$ . El valor de la temperatura crítica es pot calcular fent ús de (5) i recordant que en el cas del model d'Ising  $\nu=1$ . L'expressió resultant és:

$$T_{CL} = T_C + \frac{D}{L}. \quad (9)$$

Emprant els valors de  $T_{CL}$  obtinguts (els corresponents als extrems en els valors de la capacitat calorífica i la susceptibilitat magnètica), es pot estimar la temperatura crítica en el límit termodinàmic emprant una regressió lineal sobre els punts de  $T_{CL}$  en funció de  $1/L$ .

Les regressions lineals són:

$$T_{CL}^{Cv} = 2.2630 + \frac{0.9294}{L} \quad T_{CL}^X = 2.2639 + \frac{2.1092}{L}. \quad (10)$$

El valor de la temperatura crítica, obtingut a partir de cadascuna de les variables, correspon a la ordenada a l'origen de la regressió lineal. El valor de la temperatura

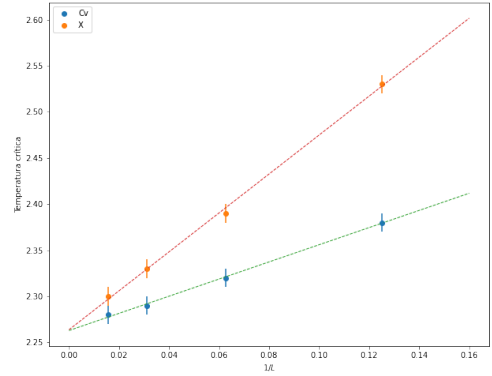


FIG. 13:  $T_{CL}$ , obtinguda a partir de l'extrem en la capacitat calorífica i la susceptibilitat magnètica, en funció de  $1/L$ , per a sistemes amb  $L=8, 16, 32$  i  $64$ .

crítica s'ha estimat com el valor mig entre aquestes dues,

$$T_C = 2.264 \pm 0.01, \quad (11)$$

on s'ha considerat l'error de  $T_{CL} = 0.01$ , que és el pas entre temperatures emprat en la simulació. Aquest valor és compatible amb el valor teòric  $T_C = 2.269$ .

## VIII. CÀLCUL DELS EXPONENTS CRÍTICS

Els exponents crítics s'han determinat emprant les relacions que apareixen a (4).

### A. Exponent $\nu$

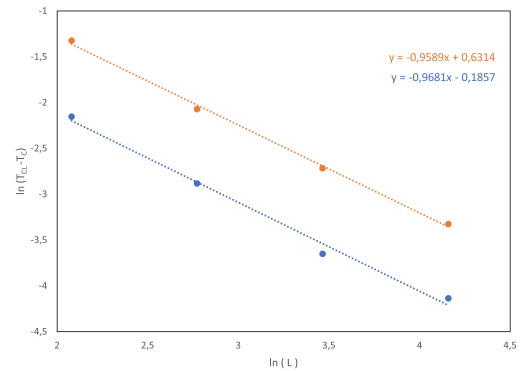


FIG. 14:  $\ln(T_{CL} - T_C)$  en funció de  $\ln(L)$ , per a les  $T_{CL}$  obtingudes a partir de la capacitat calorífica i la susceptibilitat magnètica. Regressions lineals per a ambdós conjunts de dades.

Els valors dels pendents de les regressions lineals de la

figura 14 corresponen a el valor de  $-1/\nu$ . De (5) s'obté:

$$\ln(T_{CL} - TC) = D - \frac{1}{\nu} \ln(L). \quad (12)$$

Els valors obtinguts són:

$$\nu_{C_v} = 1.033 \pm 0.064 \quad \nu_{\chi} = 1.043 \pm 0.033, \quad (13)$$

que són compatibles amb el valor teòric  $\nu = 1$ . Combinant els resultats s'obté  $\nu = 1.038 \pm 0.002$ .

### B. Exponent $\alpha$

Per a obtenir l'exponent  $\alpha$ , s'utilitza l'equació (4) i la relació (5). S'arriba a:

$$\chi(T_{CL}) = A|T_{CL} - TC|^{-\alpha} = A|DL^{-\frac{1}{\nu}}|^{-\alpha}. \quad (14)$$

D'on s'obté:

$$\ln(C_v(T_{CL})) = C + \frac{\alpha}{\nu} \ln(L). \quad (15)$$

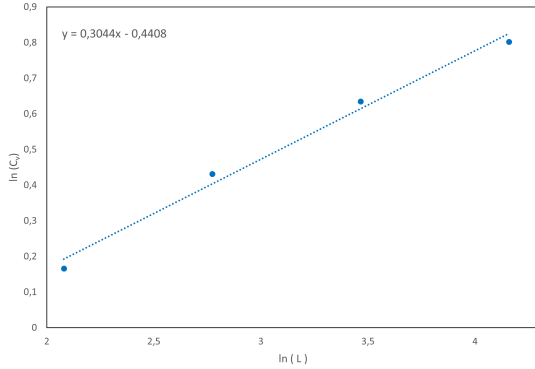


FIG. 15:  $\ln(C_v)$  en funció de  $\ln(L)$ , per a les  $T_{CL}$  i regressió lineal.

A la figura 15 es representa el logaritme de la capacitat calorífica a  $T_{CL}$  en funció del logaritme de  $L$ . De la regressió lineal realitzada,

$$\ln(C_v(T_{CL})) = -0.4408 + 0.3044 \ln(L), \quad (16)$$

s'obté el valor de l'exponent  $\alpha$ ,

$$\alpha = 0.316 \pm 0.02.^1 \quad (17)$$

Aquest valor no és compatible amb el valor teòric  $\alpha = 0$ , però és un valor proper.

<sup>1</sup> El valor de l'error s'ha obtingut fent propagació d'errors. Sigui  $m$  el pendent de la regressió,  $m = \frac{\alpha}{\nu}$  i per tant el error es calcula com  $\Delta\alpha = \nu\Delta m + m\Delta\nu$ , on  $\Delta$  fa referència a l'error associat a la variable. Els errors de la resta d'exponenta s'han calculat de manera equivalent.

### C. Exponent $\gamma$

Procedint de forma equivalent a l'apartat anterior, s'arriba a la expressió:

$$\ln(\chi(T_{CL})) = C + \frac{\gamma}{\nu} \ln(L). \quad (18)$$

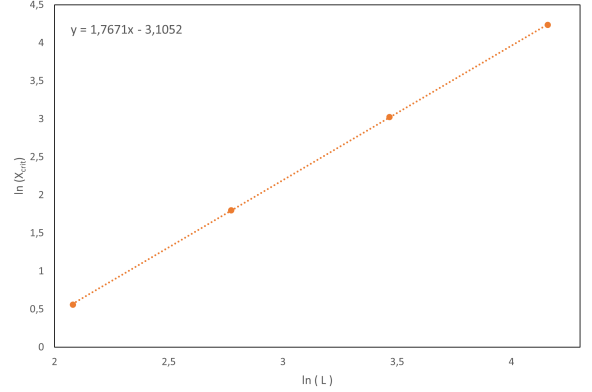


FIG. 16:  $\ln(\chi)$  en funció de  $\ln(L)$ , per a les  $T_{CL}$  i regressió lineal.

A partir de la regressió lineal representada a la figura 16, s'obté que el pendent correspon a  $\gamma/\nu$ . L'exponent gamma és doncs,

$$\gamma = 1.834 \pm 0.026. \quad (19)$$

Aquest valor no és compatible amb el valor teòric  $\gamma=1.75$ .

### D. Exponent $\beta$

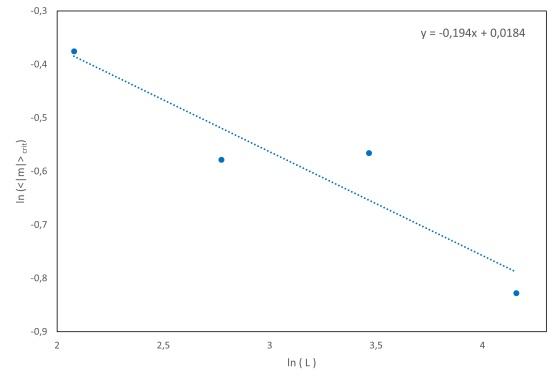


FIG. 17:  $\ln(|m|)$  en funció de  $\ln(L)$ , per a les  $T_{CL}$  i regressió lineal.

Per a l'exponent  $\beta$  l'expressió obtinguda de (4) i (5) és

$$\ln(\langle |m| \rangle(T_{CL})) = C - \frac{\beta}{\nu} \ln(L). \quad (20)$$

Per tant, en la regressió lineal obtinguda a la figura 17, el pendent de la recta és el valor de  $\beta/\nu$  obtingut de l'extrapolació de les dades experimentals al límit termodinàmic. L'exponent  $\beta$  presenta un valor

$$\beta = 0.201 \pm 0.054. \quad (21)$$

Aquest valor és compatible amb el valor teòric  $\beta=0.125$ .

### E. Exponent $\delta$

Tot i que l'exponent crític  $\delta$  no es pot obtenir directament de les dades obtingudes, es pot calcular emprant la relació d'escala:

$$\nu d = \beta(\delta + 1), \quad (22)$$

on  $d$  és el número de dimensions espacials, en el nostre cas igual a 2. Emprant aquesta relació, s'obté un valor de  $\delta = 9.33 \pm 2.79$ .<sup>2</sup>

Aquest valor no és compatible amb el valor teòric  $\delta = 15$  i presenta un error molt gran.

## IX. CONCLUSIONS

En aquesta pràctica s'ha simulat el model d'Ising en 2 dimensions emprant l'algorisme Metrópolis.

S'ha comprovat que l'anàlisi dels valors de l'energia, la magnetització, la capacitat calorífica i la susceptibilitat magnètica es corresponen amb el comportament esperat teòricament. S'ha observat que el model presenta una fase ferromagnètica a baixes temperatures i una paramagnètica a temperatures més elevades, amb una transició de fase contínua entre elles.

A més, s'ha verificat que l'estudi dels valors d'aquestes variables en variar la temperatura es correspon a un comportament pseudocrític, degut a la mida finita dels sistemes simulats. Amb les dades obtingudes per a diverses mides, escalant en potències de 2, s'ha extrapolat el comportament del sistema al límit termodinàmic ( $L \rightarrow \infty$ ), per estudiar el comportament crític del sistema.

En aquest límit, els valors obtinguts pels exponents crítics, s'apropen als valors teòrics, tot i què en molts casos no són compatibles amb els valors experimentals. Aquests resultats es troben sintetitzats a la taula següent.

Exponent	$\nu$	$\alpha$	$\gamma$	$\beta$	$\delta$
Teòric	1	0	1.750	0.125	15
Experimental	1.038	0.316	1.834	0.201	9.328

Es conclou, per tant, que el mètode emprat per a simular el model d'Ising en 2D ha estat adient i simula un comportament del sistema que es correspon amb les dades teòriques.

[1] Transparències del Campus Virtual.

[2] Apunts Fenòmens Col·lectius i Transicions de Fase. Jordi

Ortín.