

Model d'Ising

Judith Satorra Cortasa
Pablo Torrón Pérez

20 de gener de 2020

En aquest treball, estudiarem un cristall bidimensional que evoluciona d'acord amb el model d'Ising sense camp extern i considerant l'aproximació de propers veïns, i compararem els resultats obtinguts amb les prediccions teòriques del model.

1 Introducció teòrica

D'acord amb el model d'Ising, el comportament magnètic d'un cristall es pot estudiar considerant que els àtoms del material formen un lattice d'*spins* que interaccionen per parells. En presència d'un camp magnètic extern \mathcal{H} , el hamiltonià d'un cristall és

$$H = -\mu_0 \mathcal{H} \sum_{\sigma} \sigma - J \sum_{\langle \sigma' \sigma \rangle} \sigma' \sigma \quad (1)$$

d'acord amb el model.

Considerarem un cristall bidimensional d'uns 20×20 *spins*, amb condicions de contorn periòdiques —per tal d'evitar efectes de vora que impedirien que s'observi bé el comportament ferromagnètic del cristall— i interaccions únicament entre propers veïns. Llavors,

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{a=0}^{19} \sum_{b=0}^{19} \sigma_{a,b} (\sigma_{a-1,b} + \sigma_{a,b-1} + \sigma_{a,b+1} + \sigma_{a+1,b}) \quad (2)$$

on els índexs els considerem mod 20, de manera que $19 + 1 = 0$ i $0 - 1 = 19$.

En aquest hamiltonià, cada terme del sumatori representa l'energia (dividida entre J) que té un *spin* per la interacció amb els seus veïns. Com al sumatori apareix dues vegades cada interacció, dividim tot entre 2 per a obtenir l'energia total del sistema.

Pel que fa a l'energia del sistema, cal notar dues coses:

- l'energia mínima serà de $-800J$ i la tindrem quan tots els *spins* siguin iguals (siguin ± 1), la màxima serà de $+800J$ i la tindrem quan els *spins* estiguin tots alternats, i les disposicions aleatòries voltaran l'energia 0.
- a nivell local, cada *spin* pot tenir només una de les següents energies:
 - $\epsilon_0 = -4J$, $g_0 = 1$, quan els quatre veïns coincideixen.
 - $\epsilon_1 = -2J$, $g_1 = 4$, quan només un veí és diferent.
 - $\epsilon_2 = 0$, $g_2 = 6$, quan dos veïns coincideixen i els dos altres no.
 - $\epsilon_3 = +2J$, $g_3 = 4$, quan només un veí coincideix.
 - $\epsilon_4 = +4J$, $g_4 = 1$, quan els quatre veïns són d'*spin* diferent.

Notem que les degeneracions són el número de formes de triar-ne cap, un, dos, tres o quatre, d'un conjunt ordenat de quatre elements. En altres paraules, són els números combinatoris “choose 4”, la quarta filera del triangle de Tartaglia/Pascal.

La **magnetització** \mathcal{M} d'un cristall és, per definició, la suma dels moments magnètics dels *spins* que el formen.

$$\mathcal{M} := \sum_{a=0}^{19} \sum_{b=0}^{19} \sigma_{a,b} \quad (3)$$

Per al nostre sistema, \mathcal{M} pot prendre valors d'entre -400 i $+400$ en les unitats que toquin. Similarment, l'energia pot prendre valors entre $-800J$ i $+800J$. Notem, però, que els casos de magnetització ± 400 es corresponen els dos amb l'energia mínima. L'energia màxima la tindriem quan tots els *spins* tinguessin els quatre veïns diferents: quan tinguéssim una taula d'escacs. Aquesta seria la configuració que tindriem amb un cristall antiferromagnètic a $T \rightarrow 0$.

A nivell macroscòpic, \mathcal{M} és la variable conjugada de la intensitat de camp magnètic \mathcal{H} . Se'ns dona la solució d'Onsager per a la magnetització, a partir d'aplicar la col·lectivitat canònica a un cristall bidimensional quadrat a $\mathcal{H} = 0$, (4).

$$\mathcal{M}_{\text{eq}} = \begin{cases} \pm \sqrt[8]{1 - \sinh^{-4} \left(2 \frac{J}{k_B T} \right)} & T < T_C \\ 0 & T > T_C \end{cases} \quad (4)$$

Aquesta solució, doncs, prediu una transició de segon ordre entre una fase paramagnètica i una altra ferromagnètica a temperatures superiors i inferiors de

$$T_C = \frac{J}{k_B} \frac{2}{\text{arcsinh}(1)} \quad (5)$$

que seria la **temperatura crítica** del cristall. Notem que aquesta temperatura crítica no és la que prediu el model d'Ising quan fem l'aproximació de camp mig.

Per sota de la temperatura crítica, hi ha dos magnetitzacions possibles en l'equilibri termodinàmic, iguals en valor absolut i diferents en el signe. Per tant, a més de les fluctuacions al voltant del valor a l'equilibri que sempre tenim als sistemes reals, l'agitació tèrmica dels *spins* hauria de causar transicions entre un estat i l'altre a temperatures comparables o inferiors a la crítica. Sabem de teoria que les fluctuacions en l'energia $\mathcal{E} = H$ i en la magnetització \mathcal{M} estan relacionades amb els coeficients termodinàmics C_V , la capacitat calorífica a volum constant, i χ_M , la susceptibilitat magnètica, segons

$$C_V = \frac{\Delta \mathcal{E}^2}{k_B T^2}, \quad \chi_M = \frac{\Delta \mathcal{M}^2}{k_B T} A,$$

on A és l'àrea —en aquest cas, serà la longitud en 1D i el volum en 3D— del sistema.

La temperatura d'aquest sistema es pot adimensionalitzar com

$$\tilde{T} = \frac{k_B T}{J} \quad (6)$$

la qual cosa ens ajuda a parlar d'aquest sistema sense preocupar-nos del valor de J i ens ajuda a l'hora de preparar la simulació.

2 Resultats i discussió

S'han dut a terme simulacions d'aquest model (codi al .zip) per a diferents temperatures, tant per sota com per sobre del punt crític, mitjançant l'algoritme de Metropolis. Totes les dades que mostrarem fan servir la temperatura adimensionalitzada \tilde{T} i la magnetització i l'energia normalitzades amb el seu valor màxim.

Cada iteració es correspon a 150 proves de canviar un *spin*.

Tal i com mostra la Figura 1, la \mathcal{M} mesurada s'adapta bé a la que prediu el model. No només coincideixen tots els valors dins l'interval de confiança definit per l'incertesa estàndard, sinó que a més les incerteses —que queden definides per les fluctuacions del sistema— es fan ridículament grans al voltant de T_C , tal i com cal esperar d'un punt crític.

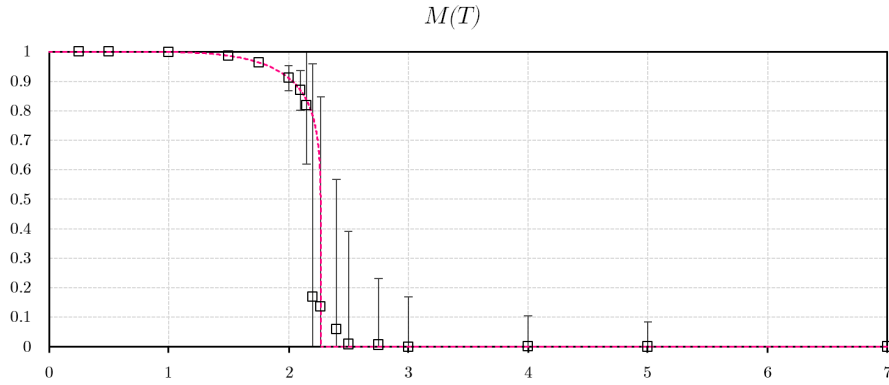


Figura 1: Dades del valor absolut de la mitjana de la magnetització relativa a l'equilibri en funció de la temperatura. S'ha promitjat sobre 200 000 iteracions per a cada mesura. La línia puntejada representa el valor teòric predit per l'equació (4).

Així doncs, no només tenim un sistema que es comporta com un sistema ferromagnètic, a més la temperatura crítica i la magnetització coincideixen amb la solució d'Onsager.

L'energia del sistema tendeix al mínim possible quan $T \rightarrow 0$ i tendeix a 0 quan $T \rightarrow \infty$, tal i com mostra la Figura 2. Les energies positives, que correspondrien a configuracions pròpies d'un sistema antiferromagnètic, no semblen ser accessibles al sistema a l'equilibri.

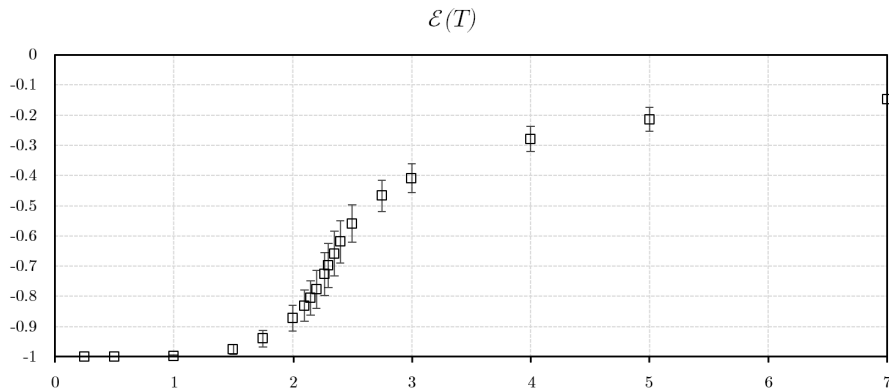


Figura 2: Dades de l'energia relativa en funció de la temperatura, en unitats adimensionalitzades. S'ha promitjat sobre 200 000 iteracions.

2.1 Temperatures baixes

A temperatures molt baixes, qualsevol configuració inicial evoluciona cap a una configuració de magnetització relativa ± 1 , a la qual s'hi mantenen amb fluctuacions negligibles quan $T \simeq 0$ i més pronunciades a mesura que augmenta la temperatura. **L'energia tèrmica no és suficientment gran com per dominar sobre la interacció magnètica**, tenim un sistema **ferromagnètic**.

El valor absolut de la magnetització a l'equilibri disminueix a mesura que la temperatura augmenta, però a $\tilde{T} < 2$ és molt proper a 1 si no 1.

Si la \mathcal{M} inicial era molt propera a 0, hi ha igual probabilitat d'arribar a la \mathcal{M}_{eq} positiva que a la negativa; però amb una diferència d'ordre major que les fluctuacions és segur que la magnetització mantindrà el seu signe.

Pel que fa al temps que triga el sistema en arribar a l'equilibri, el sistema triga entre 200 i 300 iteracions a arribar a l'equilibri amb $\tilde{T} < 1$, i entre 50 i 1000 amb $1 < \tilde{T} < 2$. I per sobre, comentem al subapartat següent que mai no s'arriba realment a un equilibri.

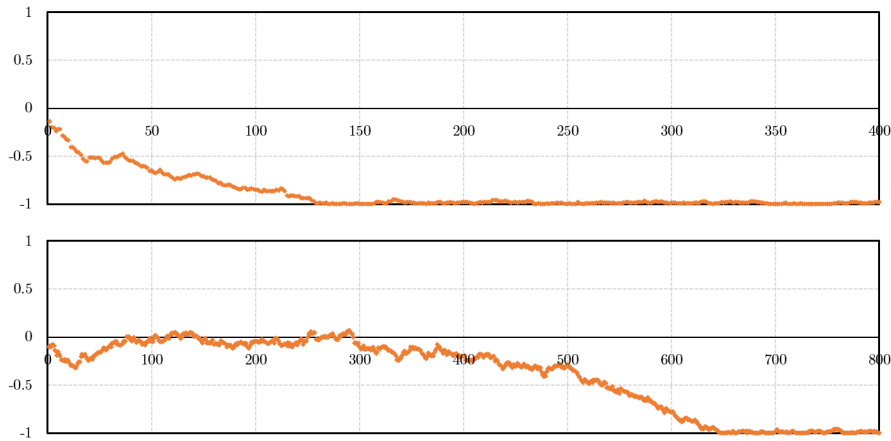


Figura 3: Primeres 400 iteracions d'una simulació a $\tilde{T} = 1.5$ i primeres 800 d'una altra a $\tilde{T} = 1.5$. S'hi aprecia la disparitat en els temps en arribar a l'equilibri.

Cal mencionar que aquesta simulació presenta una peculiaritat a temperatures **molt** baixes ($\tilde{T} \ll 1$). A aquestes temperatures costa molt que un *spin* amb tres veïns iguals canviï, de manera que s'obtenen configuracions metaestables on els *spins* es disposen en franges. Aquestes franges són o bé totes verticals o bé totes horitzontals, i sempre de mínim dos *spins* de gruix, de manera que tots tenen tres o quatre veïns iguals.

Aquestes configuracions tenen una \mathcal{M} diferent de la predita per la solució d'Onsager, i per tant els hem omès a l'hora d'elaborar les gràfiques de la Figura 1 i la Figura 2.

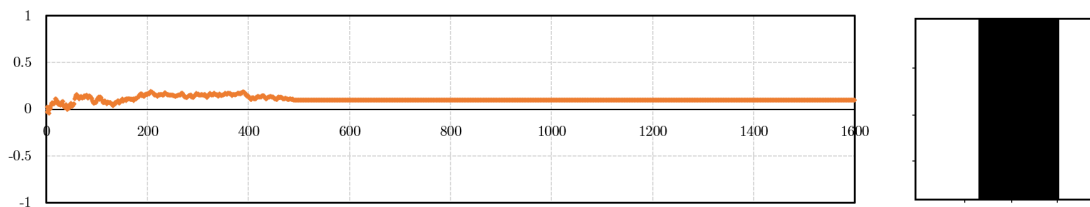


Figura 4: 1600 iteracions a $\tilde{T} = 0.1$. Tot i que les configuracions inicials aleatòries solen evolucionar a $\langle \mathcal{M} \rangle = \pm 1$ a aquesta temperatura, en casos com aquest el sistema ha arribat a un estat estacionari diferent, amb dues franges.

2.2 Temperatures properes a T_C

A partir de $\tilde{T} \simeq 2$ l'energia tèrmica no només aconsegueix que les fluctuacions siguin més pronunciades, sinó que aconsegueix que es donin transicions entre els estats estables. No obstant, seguim tenint els dos estats “estables” amb magnetització relativa ± 1 .

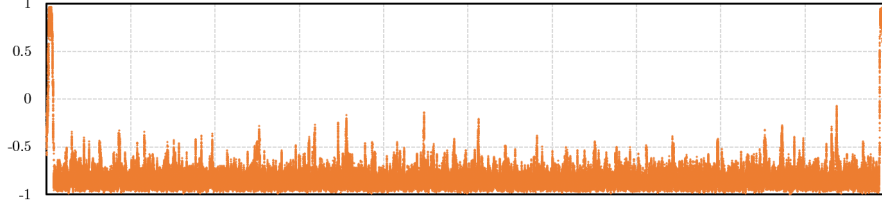


Figura 5: Primeres 200000 iteracions a $\tilde{T} = 2.15$. Just al principi i al final s’hi observen transicions entre $\langle \mathcal{M} \rangle = +\mathcal{M}_{\text{eq}}$ i $\langle \mathcal{M} \rangle = -\mathcal{M}_{\text{eq}}$.

A més, les fluctuacions es fan tan grans que les configuracions amb el 100% dels *spins* alineats es fan gairebé inaccessibles —té sentit si tenim en compte que les distribucions a T altes solen tenir una cua al principi que puja de 0 a un màxim—.

Les incerteses a la Figura 1 tenen en compte tant les fluctuacions al voltant de cada un d’aquests dos estats com els salts entre un i l’altre, i com aquests salts són més freqüents a mesura que la temperatura augmenta, té sentit que es facin molt grans quan $T \simeq T_C$. En certa manera, mai no s’arriba a un equilibri al no tenir un estat estacionari.

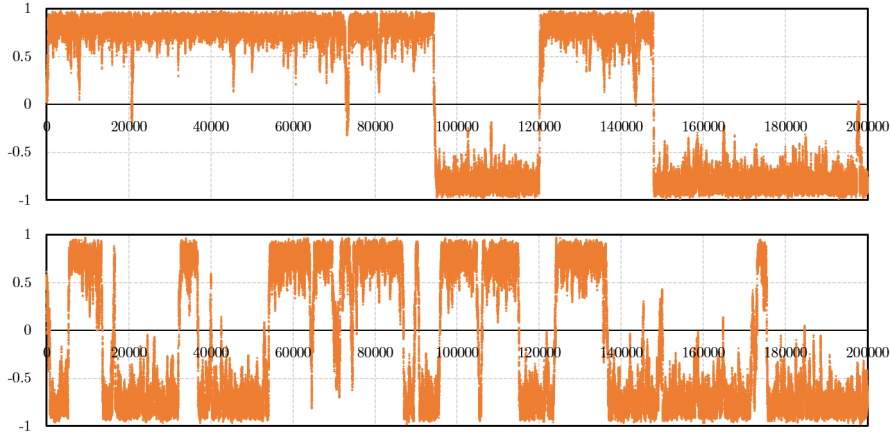


Figura 6: Primeres 200000 iteracions a $\tilde{T} = 2.2$ i a $\tilde{T} = 2.26$. Tant les fluctuacions com la freqüència de transició creixen a mesura que $T \rightarrow T_C$ per sota.

La \tilde{T}_C es, tal i com s’observa a la Figura 1,

$$\tilde{T}_C = \frac{2}{\text{arcsinh}(1)} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.26918531421.$$

Una forma d’ampliar aquest treball seria estudiar, d’una banda, les fluctuacions al voltant d’ $\mathcal{M} = \pm 1$ i, de l’altra, la probabilitat de transició entre un estat i l’altre.

Per a estudiar les fluctuacions, es podria promitjar $|\mathcal{M}|$ en comptes de \mathcal{M} —potser els pics de transició donarien problemes quan les transicions es tornin molt freqüents—; i per a estudiar la probabilitat de transició, proposem fer el gràfic del $\text{sgn}(\mathcal{M})$ i estudiar-les com un procés de Markov amb dos estats. Justifiquem això a les conclusions.

2.3 Temperatures altes

Per sobre de la temperatura crítica, les fluctuacions al voltant de cada un dels estats estables i la freqüència de les transicions s’han fet tan grans que ja no té sentit parlar de dos estats. El sistema ara fluctua al voltant d’ $\mathcal{M} = 0$, i tal i com mostra la Figura 1 —mare meva, què útil és aquesta figura— aquestes fluctuacions es fan més petites a mesura que la temperatura augmenta.

Per sobre de la temperatura crítica, **l’energia tèrmica és suficientment gran com per a dominar sobre la interacció magnètica** entre els *spins*, de manera que tenim un comportament completament **paramagnètic**.

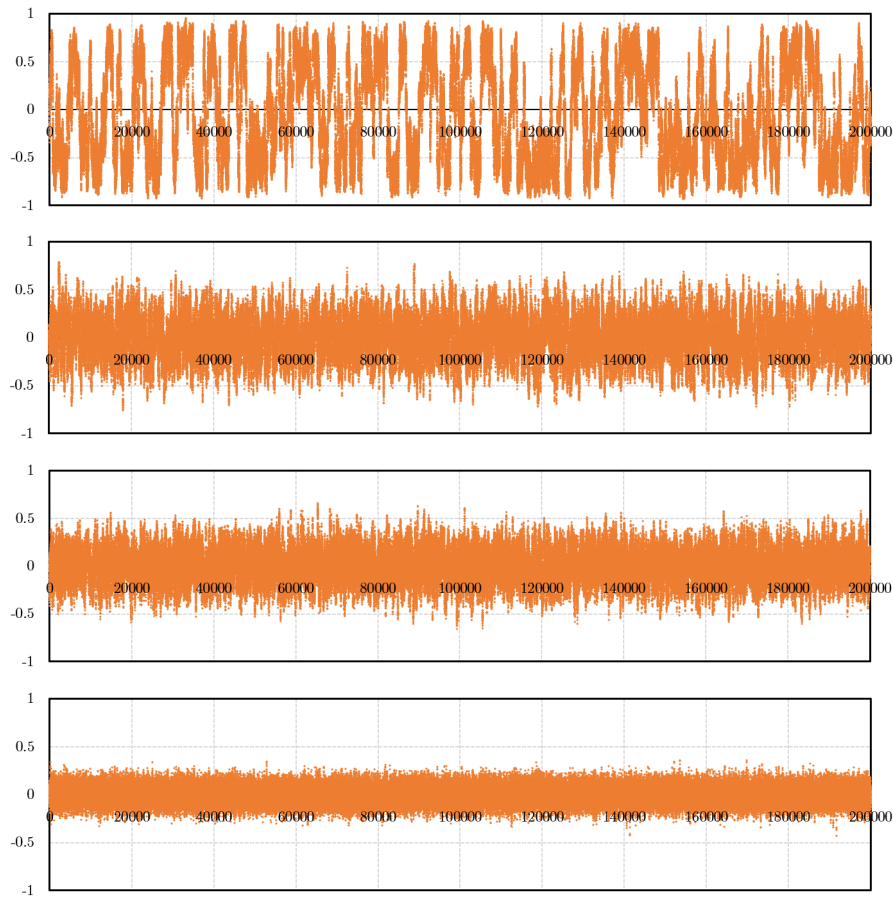


Figura 7: Primeres 200000 iteracions a $\tilde{T} = 2.5, 2.75, 3$ i 5 respectivament. Al primer cas encara s’hi pot intuir la forma dels gràfics de la Figura 6, però a la resta ja s’hi té clarament fluctuacions en torn d’ $\mathcal{M} = 0$ —l’únic estat estable ara— que disminueixen a mesura que la temperatura augmenta.

Als exemples de la Figura 7 la configuració inicial del sistema és aleatòria, de manera que el sistema no triga res a arribar a l’equilibri. Quan tenim una configuració inicial més ordenada, però, en menys de 200 iteracions s’hi arriba sempre, per a qualsevol $T > T_C$.

3 Conclusions

Les dades presentades a la segona secció i la interpretació que se n'ha fet a partir de la teoria ens permet concloure, en primer lloc, que el model d'Ising a un *lattice* bidimensional quadrat amb $\mathcal{H} = 0$, condicions de contorn periòdiques i considerant només interaccions de propers veïns dona un sistema que presenta una transició ferromagnètic-paramagnètic.

Aquesta transició es dona a la temperatura crítica que prediu la solució d'Onsager per a $\mathcal{M}(T)$, i els valors de $\langle \mathcal{M} \rangle$ a l'equilibri s'ajusten bé als de la solució —donada a (4)—.

La simulació, però, pot presentar comportaments anòmals o inesperats a temperatures molt baixes —a on s'obtenen estats estacionaris que no es corresponen amb cap dels dos estats d'equilibri predits pel la solució d'Onsager— i prop de la temperatura crítica —a on els errors es fan molt grans, tot i que això és esperable prop de qualsevol punt crític si no es fa moltíssima estadística—.

Es podria fer un estudi més profund del sistema que simulem. És per això que proposem les següents formes d'ampliar aquest treball:

- estudiar la relació entre la susceptibilitat magnètica χ_M i les fluctuacions d' \mathcal{M} . Els coeficients termodinàmics com χ_M o C_V els podem saber, tenim els valors i les incerteses de l'energia i la magnetització. Seria interessant, en particular, estudiar el seu comportament a T_C .
- estudiar les transicions entre $\pm |\mathcal{M}_{\text{eq}}|$ com un procés de Markov.

Té sentit entendre les transicions com un procés de Markov donat que la probabilitat de transició no hauria de dependre del temps que fa que el sistema es troba en un dels dos estats. A partir d'aquí, hi podríem aplicar tot el que hem après a la primera part del curs.

L'únic que potser podria causar problemes serien aquells pocs pics on el sistema està a punt de transicionar, però al final no ho fa. Tindriem llavors que als primers instants després d'una transició hi ha una probabilitat major de tornar a l'estat anterior, o potser no hauríem de tenir-los en compte en primer lloc.

- provar de trobar la distribució d'estats ocupats i veure si s'assembla a alguna distribució coneguda.

A partir de la teoria exposada a l'apartat 1, podem veure que la funció de partició per a un *spin* seria *spin* serà

$$\mathcal{Z}_1 = \sum_{i=0}^4 g_i e^{-\beta \epsilon_i} = 6 + 8 \cosh(2J) + 2 \cosh(4J)$$

però, és clar, la funció de partició del sistema no serà igual a l' N -èssima potència d'aquesta funció de partició degut a les interaccions. No obstant, potser a certs rangs de temperatura s'obté alguna distribució coneguda.

- pensar com podríem generalitzar el codi per a un sistema tridimensional i/o per a un sistema d'*spin* més gran que 1/2.
- pensar com es podria introduir un camp magnètic extern no-nul. No només canviarien el gràfic d' \mathcal{M} i l'energia mínima, sino que podrien estudiar-se fenòmens com els cicles d'histeresi.