

Ising 2D por medio de sampléo Metrópolis-Montecarlo

A. Rabinovich

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires,
Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*

(Dated: June 14, 2017)

Se estudió el comportamiento de una red 2D de spines utilizando el modelo de Ising y por medio de simulaciones Metrópolis-Montecarlo. Se obtuvo la magnetización, la energía media, el calor específico y la susceptibilidad magnética para redes de $L = 32$, $L = 64$, $L = 128$, $L = 256$ para un hamiltoniano con interacciones ferromagnéticas a primeros vecinos. Se halló una transición de fase para una temperatura crítica $T_c \approx 2,36$ en buena concordancia con el valor teórico de $T_c \approx 2,27$. Se estudió además el fenómeno de frustración magnética utilizando un hamiltoniano con interacciones antiferromagnéticas a segundos vecinos.

I. INTRODUCCIÓN

En ciertos metales como el hierro y el níquel, se observa la aparición de un momento magnético de carácter macroscópico, producido por la polarización espontánea en la misma dirección y sentido de una fracción de los spines de los átomos que constituyen el material. Esta magnetización espontánea se conoce como ferromagnetismo y es un efecto que solo se observa para temperaturas por debajo de una temperatura crítica T_c , llamada Temperatura de Curie. Para temperaturas mayores a T_c , la agitación térmica de las partículas no permite un ordenamiento espontáneo de los spines. Se observa además que a medida que la temperatura se acerca a T_c , el calor específico del material se incrementa arbitrariamente, lo que sugiere que en la Temperatura de Curie ocurre una transición de fase de un estado ordenado a uno desordenado.[1]

II. EL MODELO

La descripción teórica más sencilla del ferromagnetismo es el modelo de Ising, modelo propuesto por Wilhelm Lenz en 1920 para el estudio de la magnetización de materiales ferromagnéticos como el hierro. En Ising 2D, se modela al material como un arreglo cuadrado de spines fijos donde cada spin puede tomar dos valores distintos: $s_i = \pm 1$, figura 1, teniendo en cuenta la interacción de cada spin con sus vecinos. El hamiltoniano del modelo es por lo tanto:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J s_i s_j - \sum_{\langle ij \rangle} J' s_i s_j - B \sum_i s_i, \quad (1)$$

donde J , la constante de acoplamiento modela la interacción entre un spin y sus primeros vecinos, J' modela la interacción entre un spin y sus segundos vecinos y B es un campo magnético externo.

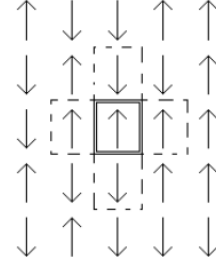


FIG. 1: Arreglo de spines fijos en el modelo de Ising. La línea punteada indica los primeros vecinos del spin encerrado por doble línea. Tomado de Muglia[2].

En este trabajo utilizaremos J y J' isótropos. Para $J > 0$ el material es ferromagnético mientras que para $J < 0$ el material es antiferromagnético. Éste hamiltoniano favorece que los spines estén alineados, porque si $s_i = s_j$ entonces la energía disminuye en una cantidad J . En el modelo de Ising 2D la temperatura crítica T_c para $B = 0$ y $J' = 0$ puede ser obtenida de forma analítica mediante la ecuación [3]:

$$T_c = \frac{J}{k_B} \frac{2}{\ln(2 + \sqrt{2})}, \quad (2)$$

con k_B la constante de Boltzmann. Tomando $\frac{J}{k_B} = 1$ se obtiene $T_c \approx 2.27$ adimensional. A lo largo de éste trabajo se utilizará $J^* = \frac{J}{k_B T}$, una J reducida adimensional.

III. PROGRAMA DE SIMULACIÓN DEL MODELO DE ISING

El valor de expectación de un observable A está dado por:

$$\langle A \rangle = \sum_{\nu} A_{\nu} p_{\nu}, \quad (3)$$

donde A_{ν} es el valor de A en el estado ν y p_{ν} es la probabilidad de que el sistema se encuentre en ese estado, por lo tanto, dado un sistema con una cantidad discreta de

estados, se podría calcular A_ν para todos los estados y calcular su promedio pesado.

La probabilidad de que un sistema de spines se encuentre en alguna configuración $\{s_\nu\}$ con energía $E\{s_\nu\}$ se puede obtener a partir del ensamble canónico y está dada por:

$$p_\nu = \frac{e^{-\beta E\{s_\nu\}}}{\sum_\nu e^{-\beta E\{s_\nu\}}} \quad (4)$$

con $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Sin embargo, para un sistema simple como el de Ising 2D, con por ejemplo $L = 20$, se tienen 2^{400} estados diferentes del sistema, por lo que resulta imposible examinarlos todos.

Para resolver éste inconveniente se puede realizar un muestréo o sampléo de algunos de los posibles estados del sistema. Para poder decidir qué estados samplear, utilizaremos el algoritmo de Metrópolis-MonteCarlo. En el mismo, en lugar de elegir estados al azar ν , calcular A_ν y pesarlo por su probabilidad, se eligen los estados con probabilidad p_ν y se pesan todos con la misma probabilidad.

Se escribió un código de simulación del modelo de Ising, empleando el algoritmo Metrópolis MonteCarlo en una red bidimensional cuadrada de espines, para obtener una colección representativa de distintos estados del ensamble canónico. Se impusieron condiciones de contorno periódicas para estudiar la magnetización en el seno de un material magnético. El algoritmo Metrópolis se puede desglosar en:

1. Se elige una configuración inicial de la red asignando 1 o -1 a cada spin de la misma de forma uniformemente aleatoria.
2. Se elige una temperatura T .
3. Se elige un spin de la red y se lo invierte (la elección puede ser aleatoria o secuencial).
4. Se calcula la energía de la nueva configuración y se la compara con la energía de la configuración en el paso anterior.
5. Si la energía disminuye, se acepta la nueva configuración del sistema.
6. Si la misma no disminuye, se acepta el nuevo estado con probabilidad $e^{-\beta \Delta E}$.
7. Se itera desde el punto (3) K veces.

En particular nos interesa calcular la energía por spin u y la magnetización por spin m estudiando su variación en función de la temperatura T . La energía se puede calcular como:

$$u = \frac{\sum_\nu E_\nu p_\nu}{N} \quad (5)$$

Mientras que m es:

$$m = \frac{\sum_\nu M_\nu p_\nu}{N} \quad (6)$$

donde $M_\nu = \frac{\#s_\nu \uparrow - \#s_\nu \downarrow}{\#s}$

Como cada valor de spin puede tomar únicamente dos valores, hay un total de 2^N estados para una red de N espines, con lo cual calcular en forma exacta las ecuaciones (5) y (6) puede volverse computacionalmente costoso. Por ello, tomaremos en cuenta sólo los estados que contribuyan mayoritariamente, tal cual se discutió anteriormente.

Teniendo eso en cuenta, la energía u se puede calcular con la siguiente aproximación:

$$u = \frac{1}{NK} \sum_{i=1}^K E_i, \quad (7)$$

donde E_i es la energía obtenida en el i -ésimo paso. Análogamente para m :

$$m = \frac{1}{NK} \sum_{i=1}^K M_i, \quad (8)$$

Además puede demostrarse que la susceptibilidad magnética, definida como $\chi = \frac{\partial M}{\partial B}$ se puede calcular como:

$$\chi = \beta (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (9)$$

y en forma análoga, el calor específico a volumen constante $c_v = \frac{\partial U}{\partial T}$ se puede calcular como:

$$c_v = \beta^2 (\langle u^2 \rangle - \langle u \rangle^2) \quad (10)$$

IV. RESULTADOS

Las primeras muestras tomadas no son representativas del sistema físico ya que cada muestra difiere en solo un espín. Se debe dejar al sistema llegar al equilibrio, tomando un número de pasos suficientemente grande (idealmente infinito).

A. Termalización

Al comenzar el algoritmo, el sistema se encuentra en punto del espacio de fases que no tiene porque ser un estado típico del sistema en equilibrio a una cierta temperatura. Después de hacer cierto número de fliepos (invertir un spin de la red), el sistema llega a encontrarse en un punto del espacio de fases en el cual los valores de la energía del sistema rondan el valor más probable. A éste

proceso se lo conoce como termalización. En la figura 2 se muestra la termalización para una red de $L = 256$, $J = J' = 0$, $B = 1$ y $T = 5$. Se observa que a partir de aproximadamente 150000 pasos de montecarlo, la magnetización del sistema alcanza la magnetización teórica dada por $\tanh(B) = \tanh(1) \approx 0.19$, por lo que se decidió termalizar todas las redes con 150000 flips.

Debido a que los pasos de la temperatura utilizados en cada experiencia fueron de $\Delta T = 0.1$, comenzando desde $T = 5$, fue suficiente termalizar al comienzo una única vez.

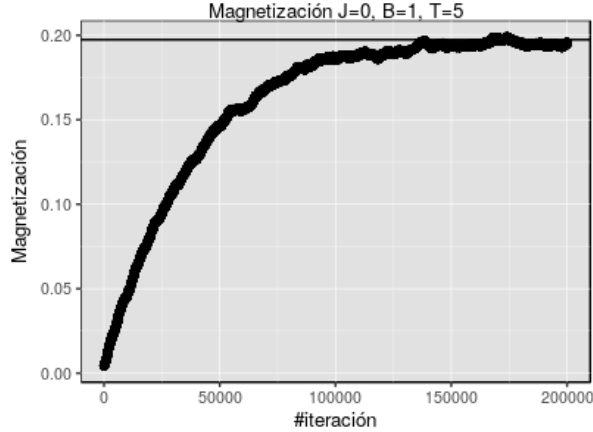


FIG. 2: Termalización en una red de $L = 256$

B. Autocorrelación

Debido a que cada muestra difiere únicamente en un spin de la anterior, las muestras están altamente correlacionadas y pueden no resultar representativas. Para poder tomar entonces muestras representativas, se calculó el coeficiente de autocorrelación dado por:

$$\rho = \frac{\langle (x_i - \mu)(x_{i+k} - \mu) \rangle}{\langle (x_i - \mu)^2 \rangle} \quad (11)$$

con x_i la magnetización o la energía en el paso i -ésimo y x_{i+k} en el paso $i+k$ -ésimo.

Se calculó la autocorrelación tomando $k = 0, \dots, 30000$ para una red de $L = 128$, $J = 1$, $J' = 0$, $B = 0$ y para $T = 5$, $T = 3$ y $T = 1.5$ y se graficó ρ vs. k , figura 3.

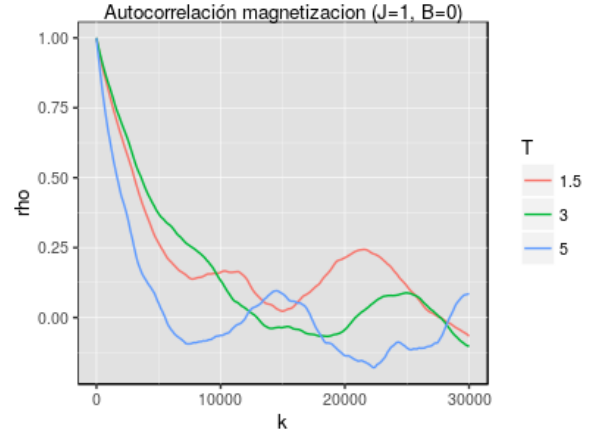


FIG. 3: Autocorrelación para una red de $L=128$

Se observa que a partir de $k = 15000$ la autocorrelación es cercana a cero para todas las temperaturas. Por lo tanto, se tomó una muestra cada 15000 iteraciones de metrópolis como muestra representativa.

C. Magnetización espontánea y susceptibilidad

Para una red de $L = 128$, comenzando desde $T = 5$ hasta $T = 0.5$ y disminuyendo la temperatura con $\Delta T = 0.1$, se realizaron 10000000 de iteraciones de MonteCarlo para cada temperatura, termalizando únicamente para $T = 5$. Se tomaron aproximadamente 650 muestras por temperatura y con ellas se calculó la magnetización media por temperatura. Se graficó un histograma de las magnetizaciones obtenidas, cómo se visualiza en la figura 4.

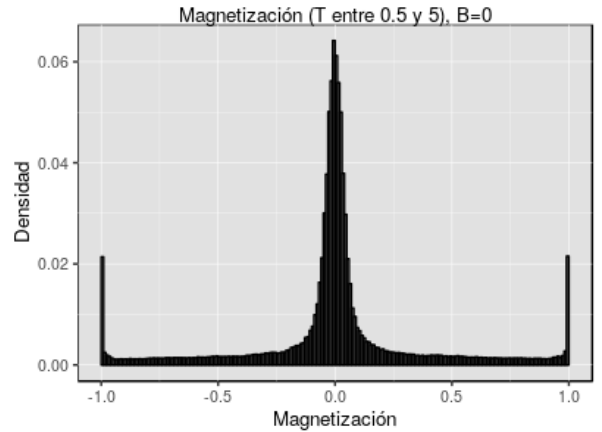


FIG. 4: Magnetización media por partícula en función de la temperatura para una red de $L=128$

Se observa una distribución bimodal de la magnetización, lo que implica la existencia de una simetría en la magnetización espontánea, dado que resulta indistinto para el sistema que los spines se polaricen hacia arriba o hacia abajo.

Para poder romper ésta simetría, se agregó una corona alrededor de la red con spines fijos apuntando hacia ar-

riba. Para redes de tamaño infinito, la corona tiene medida nula y por lo tanto no modifica los valores medios calculados. Sin embargo, alcanza para romper la simetría del sistema y lograr que la magnetización quede distribuida alrededor de uno solo de los mínimos. Se realizó el mismo cálculo anterior para redes de $L = 32$, $L = 64$, $L = 128$ y $L = 256$, obteniéndose los valores observados en la figura 5

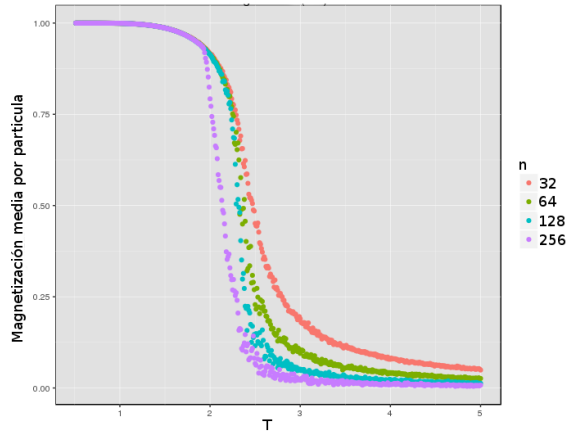


FIG. 5: Magnetización media por partícula en función de la temperatura para redes de distinto lado L

La magnetización neta es máxima y constante para temperaturas bajas ($T < T_c$), correspondiente a un estado del sistema con todos los espines alineados al producirse la magnetización espontánea, y luego se ve una súbita disminución de la magnetización para temperaturas alrededor de la temperatura crítica T_c , para luego ser prácticamente nula para temperaturas mayores. Esto se corresponde con una alineación aleatoria de los spines producto de la agitación térmica del sistema. Análogamente al caso anterior, el cambio repentino de la magnetización se relaciona con una variación brusca en la susceptibilidad magnética. En la figura 6 se graficó la susceptibilidad en función de la temperatura, donde se observa un pico en los valores de temperatura en donde ocurre el cambio en la magnetización, en los valores esperados para la T_c .

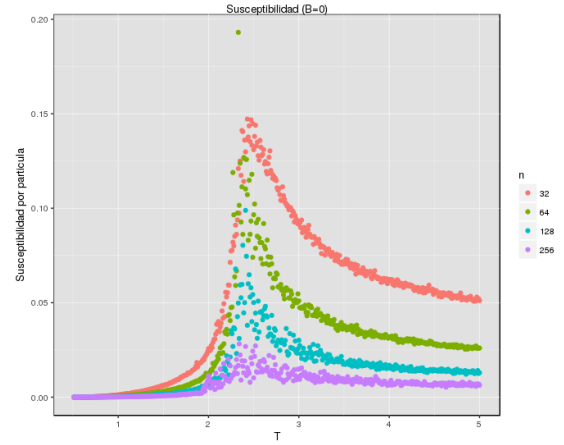


FIG. 6: Susceptibilidad magnética por partícula en función de la temperatura para redes de distinto lado L

D. Energía media y calor específico

En la figura 7 se graficó la energía media en función de la temperatura para redes de $L = 32$, $L = 64$, $L = 128$ y $L = 256$. Se observa nuevamente que a temperaturas bajas, el sistema presenta una energía mínima y constante. Esto sucede cuando los espines se alinean al presentarse una magnetización espontánea.

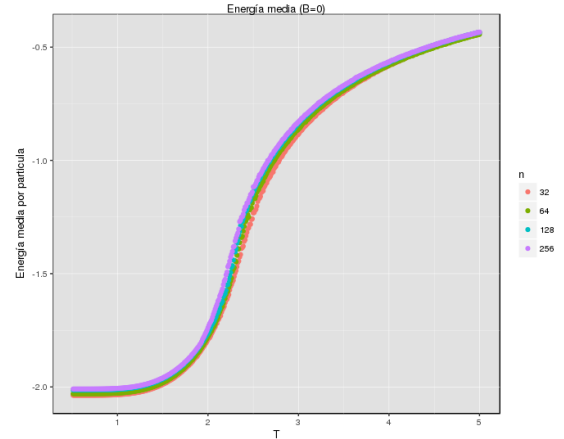


FIG. 7: Energía media por partícula en función de la temperatura para redes de distinto lado L

Se observa que la energía comienza a aumentar para $T = 1.5$ y alrededor de la T_c se observa un brusco cambio de la energía del sistema junto con un cambio de concavidad en la curva de energía. Aumentando la temperatura respecto de la T_c , se obtiene un aumento monótono de la energía. Asociado a este cambio brusco en la energía alrededor de la T_c , debe existir un pico en el calor específico del sistema. En la figura 8 se graficó el calor específico en función de la temperatura. Se observa un máximo alrededor de la temperatura T_c para todas las redes.

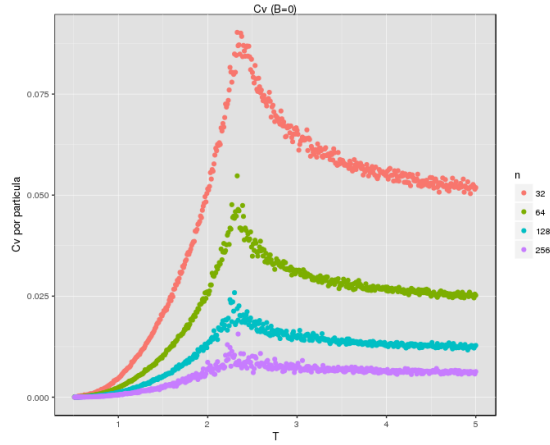


FIG. 8: Capacidad calorífica por partícula en función de la temperatura para redes de distinto lado L

Para encontrar la temperatura T_c , se ajustó por medio de un polinomio de grado 20 el calor específico para la red de $L = 64$. Luego se buscó el pico obteniéndose un máximo en $T_c \approx 2.36$, en buena concordancia con el calculado en 2. En la figura 9 se observa un gráfico del calor específico para la red de $L = 64$ y el polinomio de ajuste.

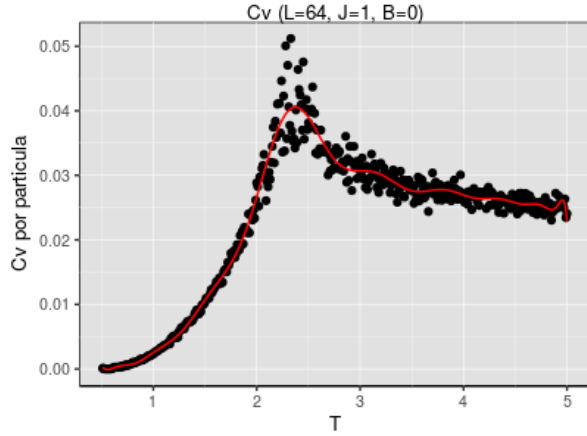


FIG. 9: Capacidad calorífica por partícula en función de la temperatura para una red de $L = 64$ y ajuste polinomial

E. Hamiltoniano con segundos vecinos y fenómeno de frustración

El fenómeno de frustración es una característica de los sistemas magnéticos que lleva a estructuras complejas. Éste fenómeno se produce por un conflicto en la interacción entre spines en la red, en donde la alineación de un spin con sus primeros vecinos reduce la energía de interacción entre ellos, pero la aumenta con sus segundos vecinos. Por ejemplo, en la red 2D, tomando un spin y suponiendo que todos sus primeros vecinos apuntan hacia arriba y sus segundos vecinos apuntan hacia abajo, con acoplamientos ferromagnéticos para sus primeros vecinos y anti para sus segundos, el spin es frustrado porque

cualquiera de sus dos orientaciones dan la misma energía. El spin no puede minimizar en simultáneo la energía con todos sus vecinos.

Tomando en el hamiltoniano de $J = 1$, $B = 0$ y $J' = -1$ se obtiene un hamiltoniano con interacciones ferromagnéticas a primeros vecinos y antiferromagnéticas a segundos vecinos, para estudiar el fenómeno de frustración en el modelo de Ising.

En la figura 10 se graficó la magnetización media en función de la temperatura para una red de $L = 64$. Se observa que no existe magnetización espontánea en el rango de temperaturas estudiado.

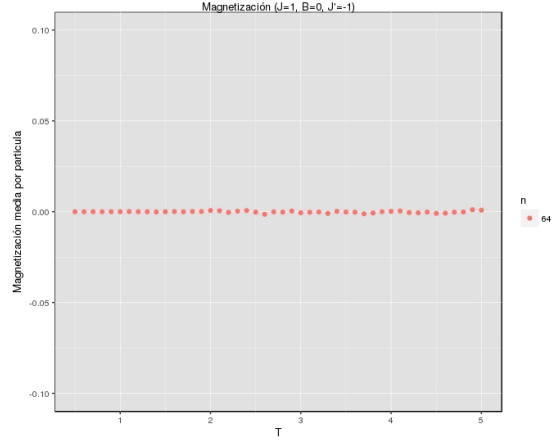


FIG. 10: Magnetización por partícula en función de la temperatura para una red de $L = 64$ a segundos vecinos.

Esto es consistente con la frustración magnética, producto de la incapacidad de minimizar la energía a primeros y segundos vecinos en simultáneo para las interacciones elegidas.

V. CONCLUSIONES

Se estudió el comportamiento de una red 2D de spines utilizando el modelo de Ising y por medio de simulaciones Metrópolis-Montecarlo. Se obtuvo la magnetización, la energía media, el calor específico y la susceptibilidad magnética para redes de $L = 32$, $L = 64$, $L = 128$, $L = 256$ para un hamiltoniano con interacciones ferromagnéticas a primeros vecinos. Se encontró un salto en la magnetización espontánea y una divergencia en el calor específico para una temperatura crítica T_c , señal de una transición de fase. Se halló que la transición de fase ocurre para temperaturas de $T_c \approx 2,36$ al ajustar por un polinomio el máximo del calor específico para una red de 64×64 spines, en concordancia con el valor teórico de $T_c \approx 2,27$. La diferencia en las temperaturas obtenidas puede ser atribuida a efectos de tamaño finito en las redes utilizadas.

Se estudió además el fenómeno de frustración magnética utilizando un hamiltoniano con interacciones antiferromagnéticas a segundos vecinos, obteniéndose efectiva-

mente una anulación de la magnetización espontanea en el rango de temperaturas estudiado.

ACKNOWLEDGMENTS

A. Rabinovich es becario doctoral del CONICET.

-
- [1] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, 1987). [3] L. Onsage, Physical Review, Vol. 65 (1944).
[2] J. Muglia, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata (2011).