

Ising 2D por medio de sampléo Metrópolis-Montecarlo

Andrés Rabinovich

12 de junio de 2017

Resumen

En el presente trabajo analizamos la magnetización y la energía de una red cuadrada de espines en función de la temperatura, empleando una simulación numérica del modelo de Ising (Montecarlo). Para ello se utilizó el algoritmo de Metrópolis, y se consideraron condiciones de contorno periódicas. Se estudió la transición de fase del sistema, comportándose como ferromagnético (paramagnético) para temperaturas menores (mayores) a $T_c \approx 2,26$.

1. Introducción

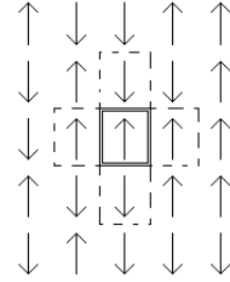
En ciertos metales como el hierro y el níquel, se observa la aparición de un momento magnético de caracter macroscópico, producido por la polarización espontánea en la misma dirección y sentido de una fracción de los spines de los átomos que constituyen el material. Esta magnetización espontánea se conoce 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.[?]

2. 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.



En

Figura 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[?].

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 [?]:

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

con k_B la constante de Boltzmann. Tomando $\frac{J}{k_B} = 1$ se obtiene $T_c \approx 2,27$ adimensional.

3. 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.

La probabilidad de que el sistema se encuentre en alguna

configuración A_ν con energía $E(A_\nu)$ se puede obtener a partir del ensamble canónico y está dada por la ecuación:

Por lo tanto, dado un sistema con una cantidad discreta de estados, se podría calcular A_{nu} para todos los estados y calcular su promedio pesado. 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.

Se escribió un código de simulación Monte Carlo del modelo de Ising, empleando el algoritmo Metrópolis 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 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 disminuyó, se acepta la nueva configuración del sistema.
6. Si la misma no disminuyó, se acepta el nuevo estado con probabilidad $\exp(-\beta\Delta E)$
7. Se itera desde el punto (3) N veces.

En particular nos interesa calcular cuatro variables, la energía U y la magnetización M , con sus respectivas desviaciones estándar σ_U y σ_M estudiando su variación en función de la temperatura T . La energía se podría calcular como:

$$U = \sum_n E_n p_n, \quad (4)$$

donde p_n es la probabilidad. Mientras que M es:

$$M = \sum_n M_n p_n. \quad (5)$$

Como cada valor de spin puede tomar únicamente dos valores, hay un total de $2N$ estados para una red de N espines, con lo cual calcular en forma exacta las ecuaciones (4) y (5) puede volverse computacionalmente

costoso. Por ello, tomaremos en cuenta sólo los estados que contribuyan mayoritariamente.

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

$$U = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i, \quad (6)$$

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

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i, \quad (7)$$

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

$$\chi = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (8)$$

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

$$C_V = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (9)$$

Para sistemas infinitamente grandes, uno espera obtener una transición de fase para una temperatura crítica T_c . Es decir, que para temperaturas por debajo de la crítica, se observe una fase ferromagnética, y por encima de dicha temperatura, una fase paramagnética. Esto implica observar un fenómeno de magnetización espontánea para el caso ferromagnético, y una magnetización nula para el caso paramagnético. Dicha temperatura puede estimarse como:

$$T_c = \frac{2J}{k \ln(1 + \sqrt{2})} \quad (10)$$

donde k es la constante de Boltzmann, que al igual que J fue definida con valor 1 en nuestro programa. Teniendo esto en cuenta esperamos, que para redes lo suficientemente grandes, tengamos un valor T_c :

$$T_c \approx \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2,269 \quad (11)$$

que es buena aproximación a medida que $N \rightarrow \infty$.

4. 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).

4.1. 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 flideos (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.

En la figura 4.1 se muestra la termalización para una red de 64x64 spines. Se grafica la energía en función del número de flideos a tres temperaturas distintas, $T=0.1$, $T=2.3$, $T=4.5$. Se observa que para $T=0.1$, a partir de aproximadamente 120000 flips, la energía del sistema prácticamente no varía, por lo que decidimos termalizar todas las redes con 120000 flips. Debido a que los pasos de la temperatura en el algoritmo eran pequeños, fue suficiente termalizar al comienzo del mismo una única vez para cada red.

4.2. Energía media y calor específico

En la figura 4.2 se graficó la energía media en función de la temperatura para redes de 10x10, 20x20, 50x50 y 64x64. A partir de una determinada temperatura, alrededor de 2.5, si baja la temperatura, baja la energía del sistema. Esto sucede cuando los espines se alinean al presentarse una magnetización espontánea.

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 4.2 se graficó el calor específico en función de la temperatura. Se observa un máximo alrededor de la temperatura T_c para todas las redes.

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 maximizó el mismo obteniéndose un máximo en $T_c \approx 2.26$, en concordancia con el calculado en 11, lo que muestra que para una red 64x64 nos encontramos prácticamente en el límite termodinámico. En la figura 4.2 se observa un gráfico del calor específico para la red de $L = 64$ y el polinomio de ajuste. La recta vertical marca la posición del máximo encontrado.

4.3. Magnetización y susceptibilidad

En la figura 4.3 se graficó el valor absoluto de la magnetización media en función de la temperatura para las cuatro redes usadas. 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.

Análogamente al caso anterior, el cambio repentino de la magnetización se relaciona con una variación brusca en la susceptibilidad magnética. En la figura 4.3 se graficó la susceptibilidad en función de la temperatura, donde se observa un pico en los valores en donde ocurre el cambio en la magnetización, en los valores esperados para la T_c .

4.4. Efectos de tamaño finito y temperatura crítica

Los efectos de tamaño finito se deben a que las muestras usadas en la simulación tiene un número de espines pequeño en comparación con el límite termodinámico.

Para los sistemas de 10x10 y 20x20 espines, observamos que el valor medio de la magnetización por espín varía suavemente desde valores cercanos a cero, para temperaturas mayores que T_c , a valores prácticamente iguales a 1 para temperaturas cercanas a cero. Es decir, no existe un cambio abrupto en el valor de la magnetización para T_c , que es lo que se espera observar en sistemas con número de espines muy grande. Al aumentar el número de espines, notamos que el sistema tiene un comportamiento que tiende al esperado en límite termodinámico. En los gráficos de magnetización media por espín para sistemas de 50x50 y 64x64, observamos que la curva tiene un cambio cada más abrupto y menos suave, a partir de $T \approx 2.26$. Para el valor de la energía media no se observan diferencias significativas al cambiar el tamaño del sistema.

5. Conclusiones

Se estudió el comportamiento de la magnetización, la energía media, el calor específico y la susceptibilidad magnética de una red cuadrada de espines en función la temperatura. Mediante la simulación Montecarlo,

empleando el algoritmo de Metrópolis, se halló que una transición de fase de ferromagnético a paramagnético ocurre en $T_c \approx 2,26$ al ajustar por un polinomio el máximo del calor específico para una red de 64×64 spines, cuando el valor teórico en el límite termodinámico era de 2,269 aproximadamente. También se analizaron los efectos de tamaño finito, analizando distintos tamaños de la red.