

Treball Simulació 2

Model d'Ising

Algoritme de metropolis

Sofia Almirante, 1527718

Pau Reig, 1527816

16 de gener 2022

1 Introducció teòrica

En el model d'Ising considerem que els dipols només poden tenir dues orientacions ($S_{i,j} = \pm 1$) i que la interacció entre els dipols es dona només pels primers veïns.

Per tant en dues dimensions tindrem el següent Hamiltonià:

$$H = -\mu B \sum_{i=1}^N S_i - J_v \sum_{\langle i,j \rangle_V} S_i S_j - J_h \sum_{\langle i,j \rangle_H} S_i S_j \quad (1)$$

On J_v és el factor J en les interaccions verticals i J_h en les interaccions horitzontals. En el nostre cas però, tenim que $J_v = J_h = J$ i tenim que el camp extern B és nul, per tant:

$$H = -J \left(\sum_{\langle i,j \rangle_V} S_i S_j + \sum_{\langle i,j \rangle_H} S_i S_j \right) \quad (2)$$

Sabem que en el model d'Ising d'una dimensió no existeix transició, és sempre paramagnètic. En aquesta simulació veurem en canvi que pel cas de dues dimensions sí que existirà una transició i l'estudiarem fent servir l'algoritme de Metropolis.

2 Model de la simulació

Per poder fer la simulació crearem una matriu 20×20 on cada casella representarà un dipol amb orientació cap amunt (+1) o cap avall (-1). Així doncs l'energia del sistema vindrà donada per (utilitzant l'expressió 2):

$$\tilde{E} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=0}^N \left[S_{ij} \cdot (S_{ij+1} + S_{ij-1} + S_{i+1j} + S_{i-1j}) \right] \quad (3)$$

On hem tingut en compte que fent només el sumatori estariem comptant cada parella (horitzontal i vertical) dues vegades, per això hem dividit entre dos el total. També hem redefinit l'energia com $\tilde{E} = E/J$.

3 Resultats i discussió

Unitats

Durant tota la pràctica farem servir les següents unitats per les magnituds corresponents.

$$[T] = \frac{1}{k_B}$$

$$[E] = \frac{1}{J}$$

k_B la constant de Boltzmann i J el coeficient d'interacció entre dipols.

També hem normalitzat l'energia dividint-la pel valor d'energia màxima del sistema:

$$\tilde{E} = \frac{E}{2 \cdot 20 \cdot 20} = \frac{E}{800}$$

Per trobar la temperatura crítica primer farem un estudi del nombre de passos que necessitem per arribar a l'equilibri en funció de la temperatura $N(T)$. Així la resta de resultats els podrem obtenir de manera més eficient i també ens ajudarà a aproximar el valor del punt crític. Al punt crític hi ha moltes fluctuacions i per tant el nombre de passos que necessitem serà molt gran.

Per trobar $N(T)$ hem trobat per quina N la mitjana de l'energia es manté en $E_{eq} \pm 0.01$ durant 50000 passos de temps consecutius. Això per cada temperatura, obtenint:

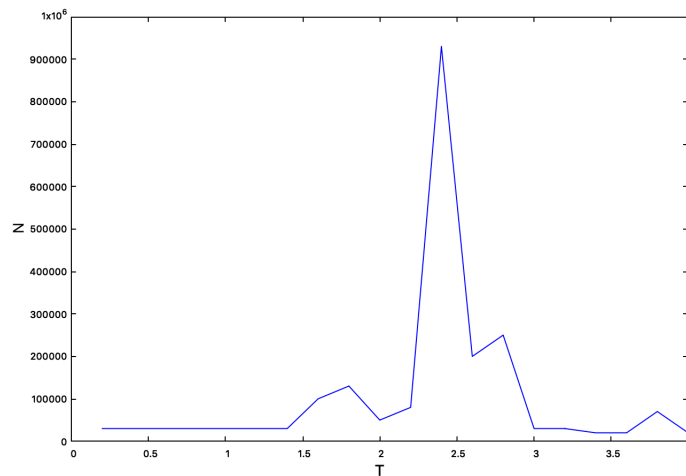


Figura 1: $N(T)$

Veiem que hi ha un salt important de N a l'interval $2 < T < 3$. On podem sospitar que hi haurà el valor de la temperatura crítica. Si tornem a fer el mateix estudi amb més detall per aquest rang obtenim:

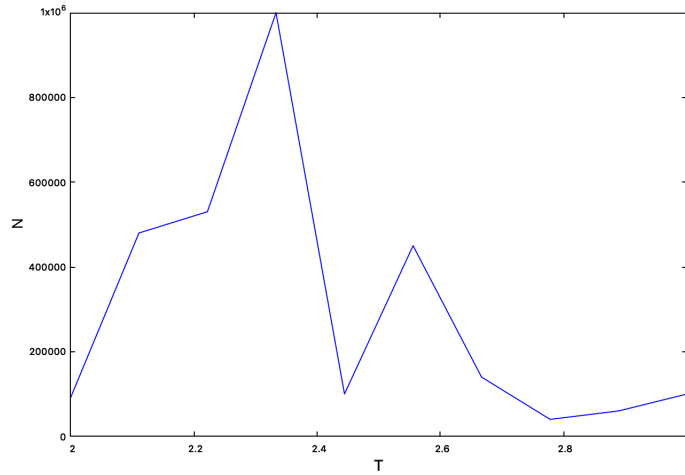


Figura 2: $N(T)$ al voltant del punt crític

Veient això podem dir que el punt crític serà:

$$T_c = 2,3 \pm 0,1$$

Sabent el rang d'on pot estar la temperatura crítica podem comprovar els 3 règims que esperem:

$$T < T_c$$

Tenint en compte que comencem amb una configuració aleatòria, per temperatures baixes la probabilitat de que l'algoritme ens canviï el sistema (quan la configuració no és favorable energèticament) val ~ 0 . Per tant el sistema evolucionarà cap a l'equilibri minimitzant l'energia. L'estat de mínima energia és el corresponent a tots els dipols alineats \implies magnetització $= \pm 1$.

Podem veure aquest resultat pel cas de $T = 1$:

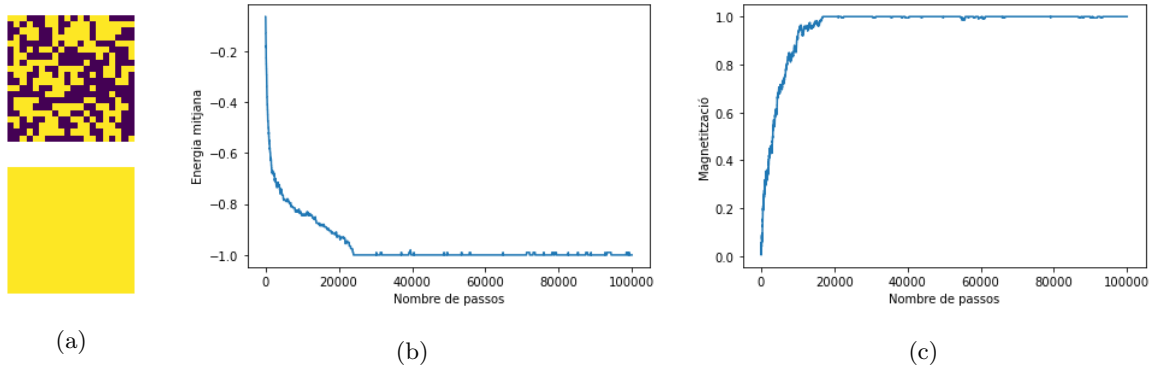


Figura 3: Resultats a l'equilibri per $T=1$

Veiem que obtenim el que esperàvem, una configuració final uniforme, amb l'energia a l'equilibri mínima i una magnetització total. Cal dir que estem representant el valor absolut de la magnetització, també podria ser que es trobessin tots els dipols cap avall tenint magnetització total -1 .

També ens hem trobat casos en què per temperatures baixes obtenim una magnetització quasi nul·la, com podem veure a la següent representació de la matriu del sistema:



Figura 4: Sistema inicialment aleatori (dalt) vs Sistema a l'equilibri per $T=1$ (baix)

Aquest fenomen el podem explicar si considerem que una estat estacionari d'aquest sistema a temperatures baixes també podria ser un en el que hi haguessin regions prou grans amb magnetització uniforme a elles. Quan les regions són prou grans són estables i per tant pot ser que per baixes temperatures tinguem sistemes a l'equilibri amb magnetització quasi nul·la.

$$T \sim T_c$$

En aquesta regió és difícil arribar a l'equilibri ja que les fluctuacions d'energia divergeixen. Això ho podem veure amb el nombre de passos que es tarda a arribar a l'equilibri. Podem veure-ho pel cas de $T = 2, 3$:

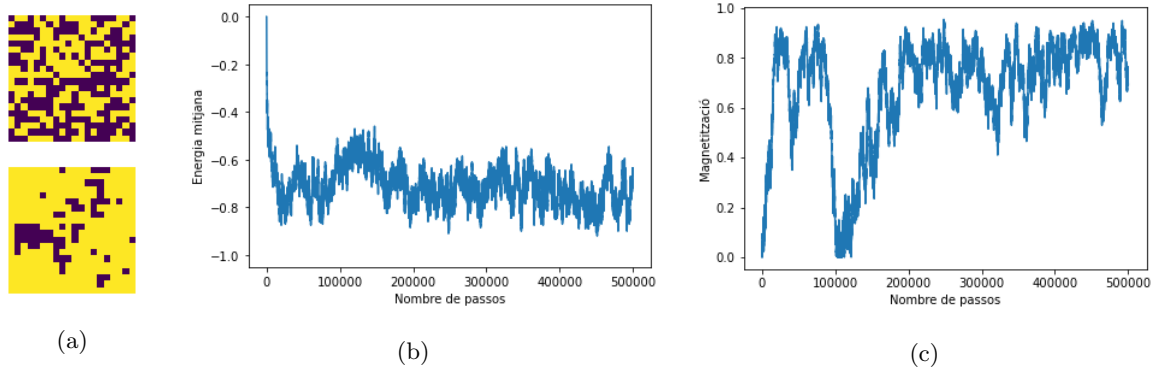


Figura 5: Resultats a l'equilibri per $T=2,3$

Efectivament podem veure que hi ha més fluctuacions, comparant-ho amb els altres rangs de temperatura, tant de la magnetització com de l'energia.

$$T > T_c$$

En aquesta regió, a diferència de la primera, la temperatura del sistema serà prou alta com perquè l'algoritme accepti configuracions no favorables energèticament i per tant el sistema no canviarà gaire de l'inicial a l'equilibri, per tant tindrà configuracions aleatòries de dipols \Rightarrow magnetització = 0.

Podem veure aquest resultat pel cas de $T = 5$:

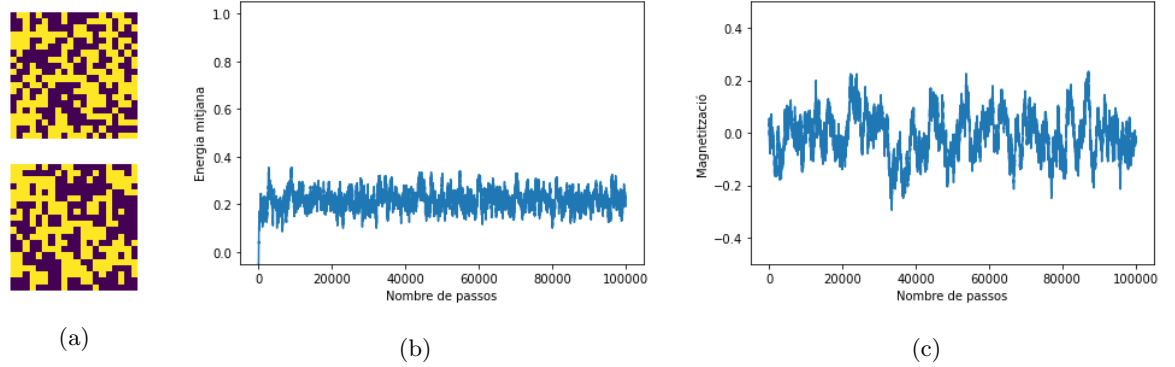


Figura 6: Resultats a l'equilibri per $T=5$

Com hem comentat veiem que obtenim una configuració de dipols semblant a la inicial, això ens indica que el sistema ja estava quasi a l'equilibri i per això ja des de pocs passos està oscil·lant respecte el mateix valor. Al trobar-nos a l'equilibri en una fase desordenada tindrem llavors una magnetització amb mitjana nul·la, com esperàvem.

Un cop fet l'estudi per cada regió podem representar $M(T)$ i $E(T)$ amb l'ajuda de $N(T)$ i així acabem de veure el comportament a prop de la zona crítica $T \simeq 2,3$.

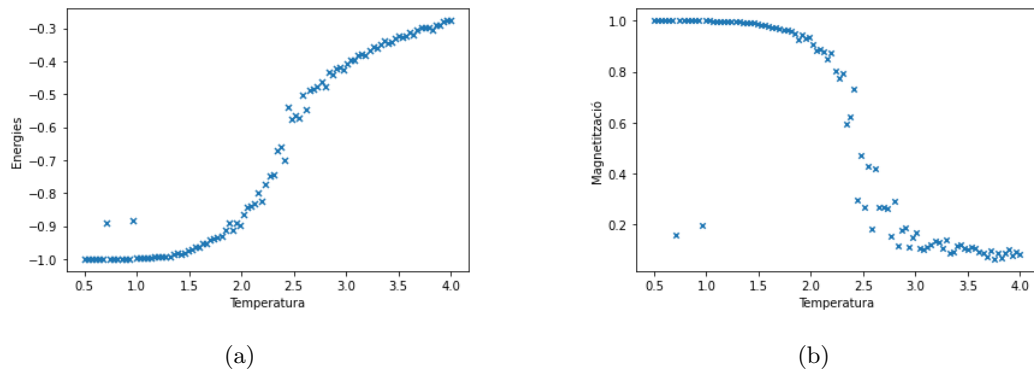


Figura 7: $E(T)$ i $M(T)$

Amb $M(T)$ podem observar que efectivament hi ha una transició ferro-paramagnètica caracteritzada pel punt crític.

Es pot veure una zona ferromagnètica ($m = 1$) per temperatures inferiors a la crítica ($T_c \simeq 2,3$) i

una zona paramagnètica ($m = 0$) per temperatures superiors.

També podem observar algun punt a baixes temperatures amb magnetització diferent a 1 (i energies per sobre -1). És el fenomen que hem explicat anteriorment quan parlàvem de la regió $T < T_c$. Per l'energia en canvi veiem que augmenta a mesura que creix la temperatura amb un màxim de creixement (punt d'inflexió) al voltant de la temperatura crítica. Això té sentit com veurem més endavant ja que la derivada de l'energia en funció de la temperatura és la calor específica, que divergeix a prop del punt crític. També veiem que l'energia tendeix a 0 per altes temperatures.

4 Exponent crític

A prop dels punts crítics es pot observar que les propietats físiques segueixen lleis de potència en $\Delta T = |T - T_c|$. En el nostre cas buscarem l'exponent β , tal que:

$$M \propto |T - T_c|^\beta \quad (4)$$

Per fer-ho ens aproparem al punt crític i representarem els logaritmes per poder fer una regressió lineal i trobar l'exponent:

$$\log M = \beta \log |T - T_c| + C \quad (5)$$

El gràfic que hem trobat:

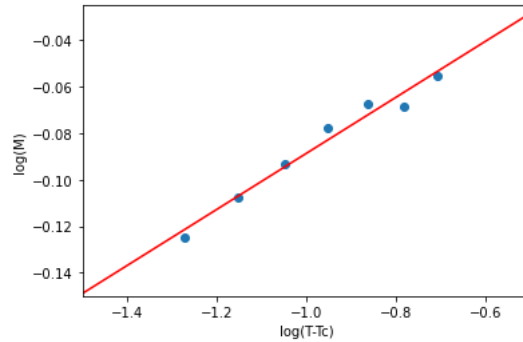


Figura 8: $\log M$ vs $\log |T - T_c|$ i recta de regressió

On els punts blaus corresponen a les dades obtingudes i la línia recta, la recta de regressió que té la següent expressió:

$$y = 0,121x + 0,032 \quad (6)$$

Amb un $R^2 \simeq 0,97$.

Per tant comparant-ho amb l'expressió 5 que esperàvem podem dir que el valor de β és:

$$\boxed{\beta = 0,121 \pm 0,012}$$

Que si ho comparem amb el valor teòric de $\beta = 1/8 = 0,125$ veiem que el nostre resultat és coherent amb la teoria amb un error del $\sim 3,5\%$.

5 Susceptibilitat i calor específica a camp nul

Calor específica

Tenint en compte que $C = \frac{\partial U}{\partial T}$ i que $U = \langle E \rangle$, podem calcular la variació d'energia per cada interval de temperatura i representar-ho en funció de T .

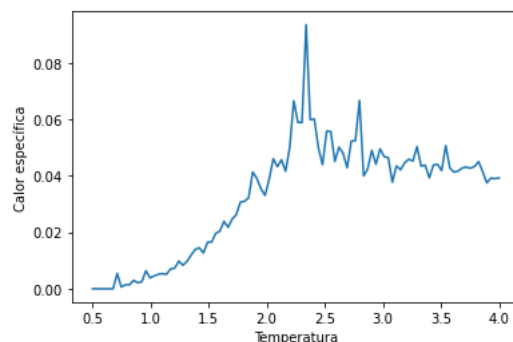


Figura 9: Calor específica vs T

Podem veure que quan s'apropa a la temperatura crítica el seu valor augmenta considerablement, de fet en teoria C_V divergeix just al punt crític, per tant aquest augment que veiem, si tinguéssim més poder de computació podríem veure que va creixent encara més en aquest punt.

Susceptibilitat magnètica

Aquí no podem fer servir la definició de la forma $\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H}$ perquè no tenim camp extern, però recordant la relació amb les fluctuacions de la magnetització:

$$\chi \propto \Delta M^2(T) \quad (7)$$

Podem representar-ho i trobem:

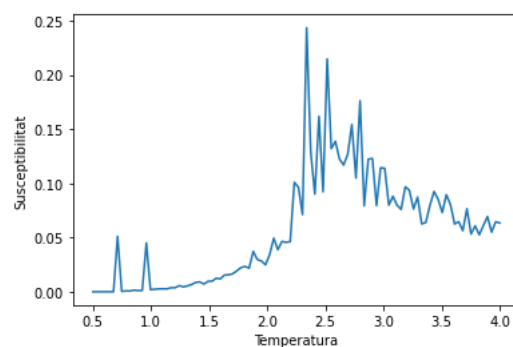


Figura 10: $\chi(T)$

Observem un comportament semblant al de la calor específica, ja que la susceptibilitat també divergeix en el punt crític. Cosa que ja podem deduir amb la relació de fluctuacions i observant el gràfic de $M(T)$ on al punt crític s'observa que les fluctuacions augmenten.

6 Estadística de Maxwell-Boltzmann

Per comprovar que es compleix l'estadística de Maxwell-Boltzmann farem un histograma del nombre de posicions en cada estat d'energia, per una temperatura fixada i a l'equilibri, i veurem si es compleix que:

$$\frac{\langle n_i \rangle}{N} = \frac{g_i e^{-E_i/kT}}{8 + 2(e^{-2/T} + e^{2/T}) + 4(e^{-1/T} + e^{1/T})} \quad (8)$$

On N és el nombre total de partícules i g_i la degeneració del nivell amb energia E_i .

Sabem però que l'estadística de Maxwell-Boltzmann només es compleix quan estem a temperatures altes o quan els estats stan poc poblats (límit no degenerat). Anem a estudiar aquests casos:

Per $T = 1, 5$:

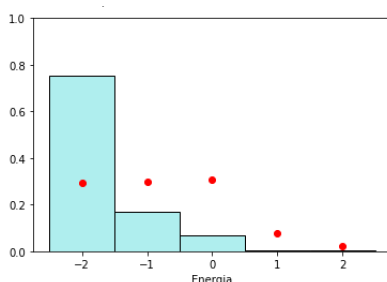


Figura 11: Histograma de n/N a cada estat d'energia per $T = 1, 5$

Podem veure que efectivament com que ens trobem en el cas de baixes temperatures i a una densitat d'estats elevada (pel cas de $E = -2$), no es compleix l'estadística de Maxwell-Boltzmann.

Si augmentem la temperatura a $T = 10$ en canvi, observem:

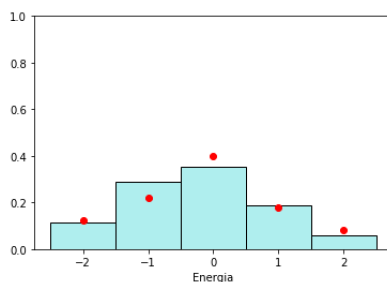


Figura 12: Histograma de n a cada estat d'energia per $T=10$

Que sí que observem el cas esperat.

Podem argumentar també aquests resultats pel cas concret d'aquesta simulació:

A temperatures baixes, com hem vist, l'energia tendeix a minimitzar-se i per tant la majoria de caselles estaran a l'estat de mínima energia (observem el pic de probabilitat d'estar a $E = -2$).

A temperatures altes en canvi, l'energia tendeix a 0 igual que la magnetització. Això fa que els estats amb energies (en valor absolut) més altes, que corresponen a estats més ordenats, són menys probables i en canvi els estats més desordenats, que tenen energia 0, són els més probables.