

Voluntario ising

Carlota Salgado Moyano

Junio 2023

Índice

| | |
|--|----|
| 1. Introducción | 2 |
| 2. Resultado exacto de Onsager | 2 |
| 3. Comportamiento para temperaturas y tamaños | 2 |
| 4. Exponentes críticos y teoría de tamaño finito | 5 |
| 5. Punto crítico | 6 |
| 5.1. $N=16$ | 6 |
| 5.2. $N=32$ | 7 |
| 5.3. $N=64$ | 8 |
| 5.4. $N=128$ | 9 |
| 5.5. Calor específico | 10 |
| 6. Exponente crítico β de la magnetización | 11 |
| 7. Estudio de la función de correlación frente temperatura | 11 |
| 8. Conclusión | 13 |
| 9. Bibliografía | 13 |

1. Introducción

En este trabajo voluntario 1 realizaremos una extensión del segundo trabajo obligatorio, Modelo Ising: una introducción al método de Monte Carlo.

Se describirá el comportamiento de la magnetización promedio, la energía media, el calor específico y la función de correlación para el rango de temperaturas y tamaños. Los resultados obtenidos se compararán con el resultado exacto de Onsager. Además vamos a estimar el valor del punto crítico, y obtener numéricamente el exponente crítico β de la magnetización y comparar con el resultado exacto.

Antes de comenzar con los análisis de nuestros datos debemos hacer una pequeña introducción teórica, el desarrollo que lleva al resultado exacto de Onsager.

2. Resultado exacto de Onsager

Debemos realizar la estimación de la T_c de un modelo Ising 2D, con bordes abiertos. En este caso el muro Bloch es una línea de longitud L . La energía adicional asociada a la pared será $E_w = 2J \cdot L$, pero la entropía deberá aproximarse mediante “el camino de un peatón de Manhattan”. Si suponemos que el muro se forma a lo largo del camino de un “peatón de Manhattan” viajando entre sus nodos, en cada cruce, el peatón podrá seleccionar 3 opciones de 4 direcciones posibles (excepto la que conduce hacia atrás), de manera que hay aproximadamente $3^{L-1} \approx 3^L$ opciones para una caminata a partir de un punto determinado. Sabiendo que los bordes abiertos de una forma cuadrada con N giros, tienen una longitud de $N^{1/2}$, por lo tanto, hay $N^{1/2}3^L$. Y estimando S_w como $\ln(N^{1/2}3^L)$, obtenemos:

$$F_w = E_w - TS_w \approx 2JL - T \ln(N^{1/2}3^L) \equiv L(2J - T \ln 3) - (T/2) \ln N \quad (1)$$

Y definimos el valor crítico a partir del cuál la derivada $\frac{\partial F_w}{\partial L}$ cambia de signo:

$$T_c = \frac{2J}{\ln 3} \approx 1,82J \quad (2)$$

El conteo preciso de los autocruces del camino es complicado, pero fue realizado por L. Onsager en 1944, obteniendo un sencillo resultado. Del resultado exacto de Onsager:

$$T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,269J \quad (3)$$

3. Comportamiento para temperaturas y tamaños

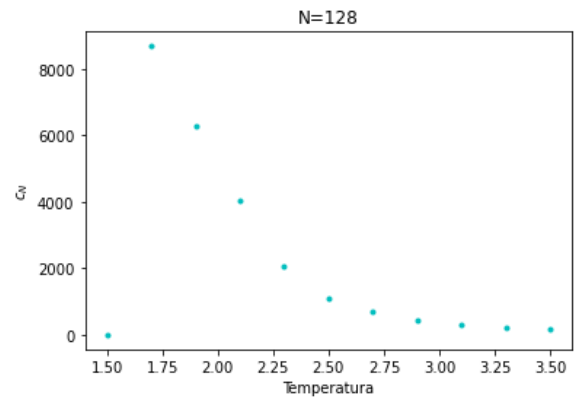
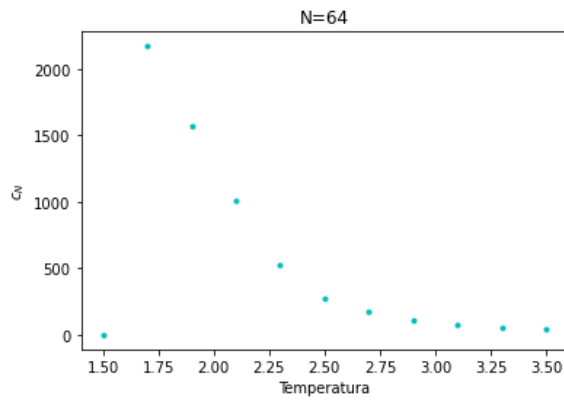
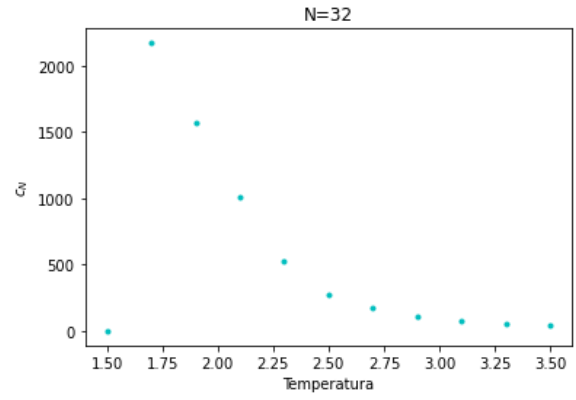
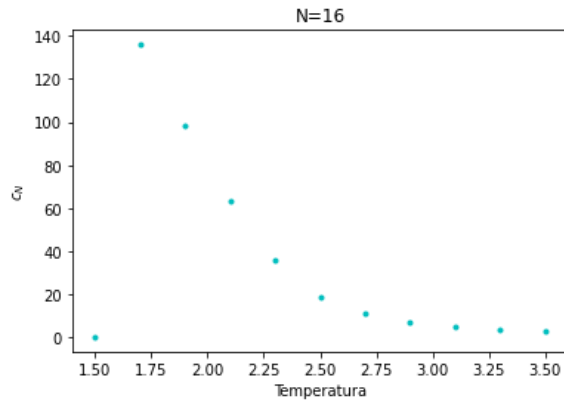
En este apartado representaremos las tablas de datos en vez de las gráficas, pues estas se realizarán en los siguientes apartados para la magnetización y la correlación. Sin embargo al final de este apartado, mostraremos las gráficas de la calor específico y energía para cada N , con el fin de clarificar su comportamiento a medida que varía la temperatura.

| N=16 | | | | |
|------|-----------|------------|------------|----------|
| T | m_N | e_N | c_N | f(i) |
| 1.5 | 0.986458 | -15.608011 | 0.287630 | 0.973086 |
| 1.7 | 0.485130 | -7.594623 | 135.961203 | 0.470641 |
| 1.9 | 0.312865 | -4.827487 | 98.472562 | 0.293720 |
| 2.1 | 0.078667 | -3.324568 | 63.650999 | 0.189914 |
| 2.3 | 0.001324 | -2.250262 | 35.933851 | 0.098012 |
| 2.5 | 0.000005 | -1.511771 | 18.729069 | 0.033889 |
| 2.7 | -0.000049 | -1.106151 | 11.124955 | 0.011839 |
| 2.9 | -0.000307 | -0.859769 | 7.302149 | 0.005246 |
| 3.1 | -0.000113 | -0.694882 | 5.107240 | 0.002932 |
| 3.3 | -0.000082 | -0.570654 | 3.651164 | 0.001329 |
| 3.5 | 0.000112 | -0.481619 | 2.729240 | 0.000883 |

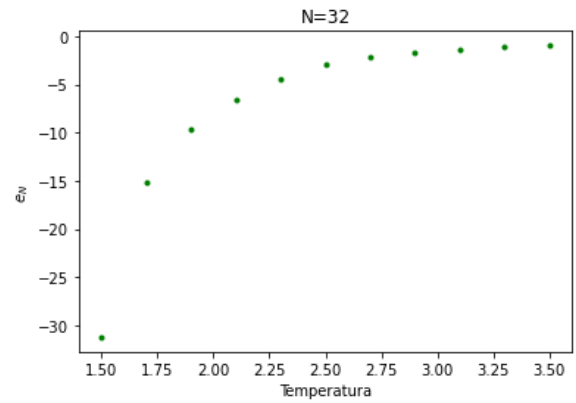
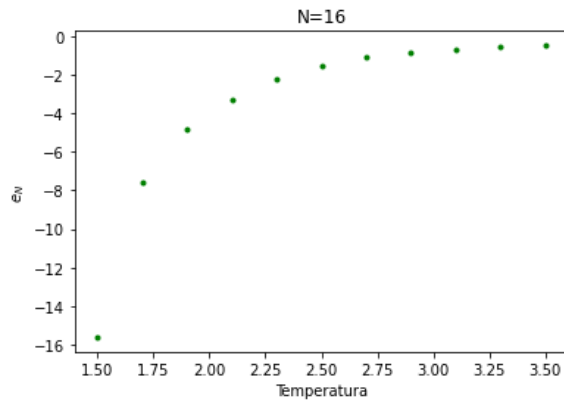
| N=32 | | | | |
|------|-----------|------------|------------|----------|
| T | m_N | e_N | c_N | f(i) |
| 1.5 | 0.986506 | -31.217797 | 0.297037 | 0.973207 |
| 1.7 | 0.485106 | -15.187352 | 542.844629 | 0.470572 |
| 1.9 | 0.312811 | -9.653378 | 392.685155 | 0.293614 |
| 2.1 | -0.110478 | -6.651233 | 253.293634 | 0.189875 |
| 2.3 | -0.018377 | -4.402349 | 135.698537 | 0.086896 |
| 2.5 | 0.000989 | -2.951954 | 70.089832 | 0.025427 |
| 2.7 | -0.000227 | -2.203480 | 43.388168 | 0.010581 |
| 2.9 | 0.000006 | -1.719993 | 28.723067 | 0.005129 |
| 3.1 | -0.000260 | -1.386386 | 19.963009 | 0.002569 |
| 3.3 | -0.000082 | -1.141700 | 14.316301 | 0.001437 |
| 3.5 | 0.000021 | -0.959539 | 10.602495 | 0.000813 |

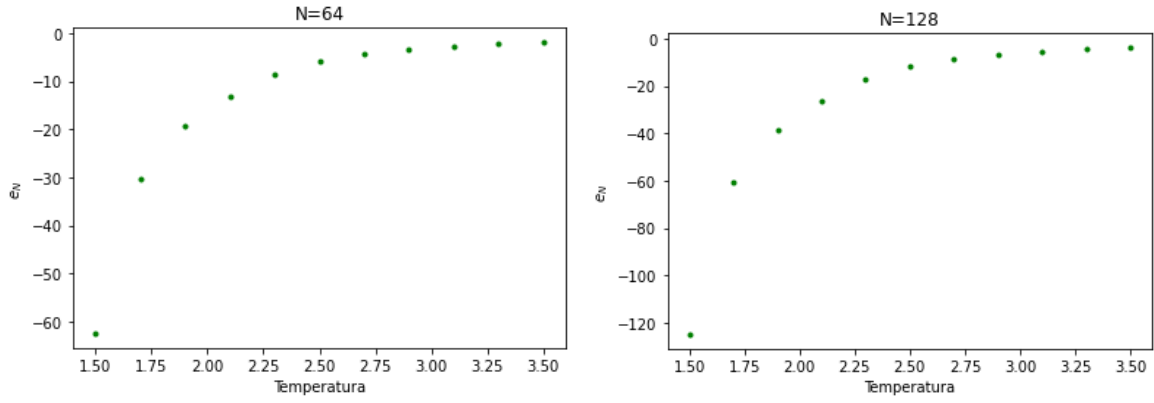
| N=64 | | | | |
|------|-----------|------------|-------------|----------|
| T | m_N | e_N | c_N | f(i) |
| 1.5 | 0.986479 | -62.433775 | 0.298697 | 0.973136 |
| 1.7 | 0.485128 | -30.376664 | 2170.796332 | 0.470636 |
| 1.9 | 0.312811 | -19.304191 | 1569.210607 | 0.293615 |
| 2.1 | 0.217175 | -13.294433 | 1010.382013 | 0.189797 |
| 2.3 | 0.009752 | -8.683101 | 525.451247 | 0.079708 |
| 2.5 | 0.000032 | -5.900121 | 278.838039 | 0.025069 |
| 2.7 | 0.000035 | -4.406663 | 172.836066 | 0.010661 |
| 2.9 | -0.000191 | -3.439520 | 114.386313 | 0.005080 |
| 3.1 | -0.000052 | -2.771808 | 79.430685 | 0.002604 |
| 3.3 | -0.000020 | -2.286906 | 57.152146 | 0.001450 |
| 3.5 | -0.000002 | -1.918766 | 42.153753 | 0.000838 |

| N=128 | | | | |
|-------|-----------|-------------|-------------|----------|
| T | m_N | e_N | c_N | f(i) |
| 1.5 | 0.986507 | -124.873884 | 0.293322 | 0.973199 |
| 1.7 | 0.485121 | -60.752282 | 8682.019472 | 0.470621 |
| 1.9 | 0.312836 | -38.612478 | 6277.146001 | 0.293657 |
| 2.1 | 0.217274 | -26.600684 | 4043.608478 | 0.189937 |
| 2.3 | 0.000401 | -17.206993 | 2060.526387 | 0.075088 |
| 2.5 | 0.000018 | -11.801295 | 1114.499534 | 0.025061 |
| 2.7 | -0.000087 | -8.813588 | 690.701307 | 0.010669 |
| 2.9 | -0.000073 | -6.877352 | 456.827227 | 0.005071 |
| 3.1 | 0.000026 | -5.541928 | 317.159134 | 0.002617 |
| 3.3 | 0.000037 | -4.571188 | 228.048055 | 0.001459 |
| 3.5 | 0.000016 | -3.840064 | 168.603617 | 0.000845 |



Observamos como para todas las N , a temperatura 1.5 nuestro calor específico es casi nula, debido a la falta de fluctuaciones térmicas.





Vemos que a medida que aumenta N , el valor absoluto del que parten la energía y el calor también aumenta, la diferencia se basa en que sin realizar el valor absoluto, el calor específico es negativo. Además en las tablas, y próximamente en las gráficas, vemos como la función correlación a penas varía.

4. Exponentes críticos y teoría de tamaño finito

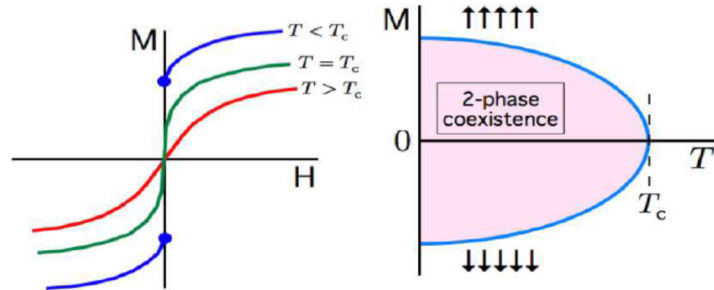
Los exponentes críticos describen el comportamiento de magnitudes físicas en las proximidades de las transiciones de fase, en el caso presente magnético, se encuentra cerca de la temperatura crítica. Según la ecuación de la temperatura crítica reducida:

$$\epsilon = \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| \quad (4)$$

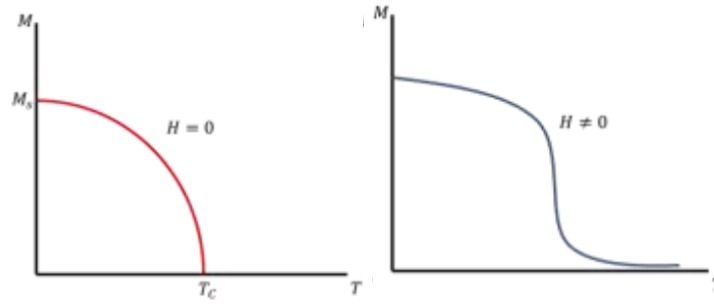
La relación obtenida para los exponentes críticos para los sistemas magnéticos será:

- Calor específico $\rightarrow C_H \sim |\epsilon|^{-\alpha}$
- Magnetización $\rightarrow M \sim (-\epsilon)^{-\beta}$

Y ¿cuándo ocurren las transiciones de fase? Bien, las transiciones de fase en un sistema se presentan cuando se produce un cambio en la singularidad de su energía libre. La transición de fase ocurre a una cierta temperatura, llamada temperatura crítica. Así como los fenómenos que ocurren en las proximidades de la temperatura crítica, se denominan fenómenos críticos.



En los sistemas ferromagnéticos sabemos que a altas temperaturas, $T > T_c$, pasaríamos a estar en una fase paramagnética; además partiendo desde temperaturas bajas y campo magnético cero, la magnetización decrece a medida que la temperatura aumenta, como consecuencia del desorden entrópico del sistema, tendiendo a cero al aproximarse a T_c . Sin embargo en el caso de existir campo magnético, se observaría una pequeña cola en la curva de la magnetización, asociada a la remoción de la transición de fase causada por el campo. Veremos estos casos ilustrados gráficamente:



Explicaremos ahora la teoría de tamaño finito. Un cuerpo de tamaño finito es considerado como un sistema de partículas que interactúan como los átomos individuales del cuerpo. Estas interacciones entre las partes del cuerpo pueden ser fuertes, lo cuál implicaría un movimiento rígido del cuerpo donde las posiciones de las partículas se mantienen fijas entre sí, pero permitiendo la traslación y rotación del cuerpo. Por el contrario, en interacciones más débiles entre los cuerpos, son importantes los grados vibracionales adicionales de movimiento relativo entre los átomos individuales.

Así para la resolución de problemas recurriendo a los ordenadores, la división de la geometría en pequeños elementos permitirá que resuelvan un problema complejo de forma más eficiente. Sustituimos un número infinito de variables desconocidas, por un número limitado de elementos de comportamiento bien definido. Estos elementos finitos están conectados entre sí por nodos, y al conjunto de ambos se le denomina malla. Cuánto menor sea el tamaño a analizar y mayor el número de elementos en una malla, más precisos serán los resultados de las análisis.

5. Punto crítico

Realizaremos una representación gráfica de la magnetización de nuestro supuesto material, que sufre un cambio brusco con la temperatura, para localizar de forma aproximada el cambio de ferromagnético a paramagnético. También, tal y como nos pide el guión, calcularemos el máximo del calor específico.

5.1. N=16

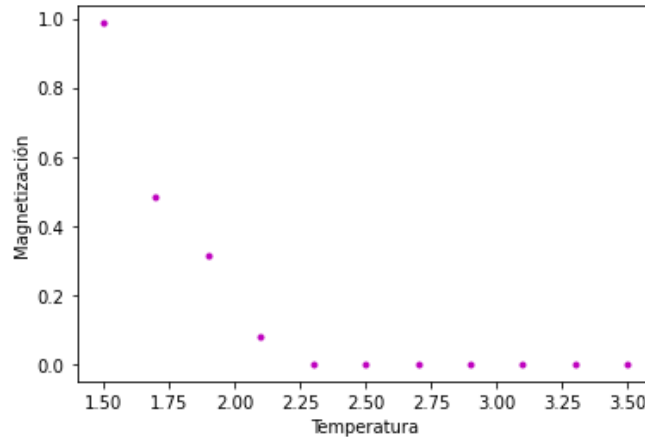


Figura 1: Sabemos que T_c debe coincidir con el resultado exacto de Onsager.

Para comprobar si daban resultados razonables, se quiso realizar un ajuste que diera una ecuación de donde se pudiera despejar un resultado de T para $m_N=0$. Después de intentarlo con un ajuste exponencial, y otro cuadrático, se observa que el más acertado para este caso sería un ajuste cúbico. Una vez realizado, con un programa que se adjuntará con la entrega de este informe, se obtuvo:

$$m_N = AT^3 + BT^2 + CT + D \quad (5)$$

Siendo $A = -0.43604235657571583$, $B = 3.763161523334256$, $C = -10.691861863509951$, $D = 9.995374874370327$

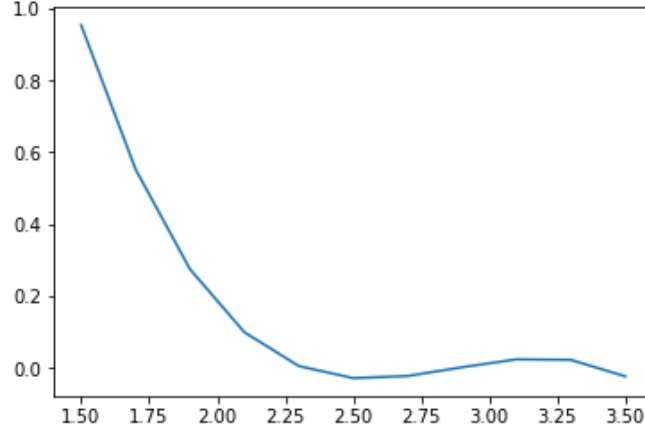
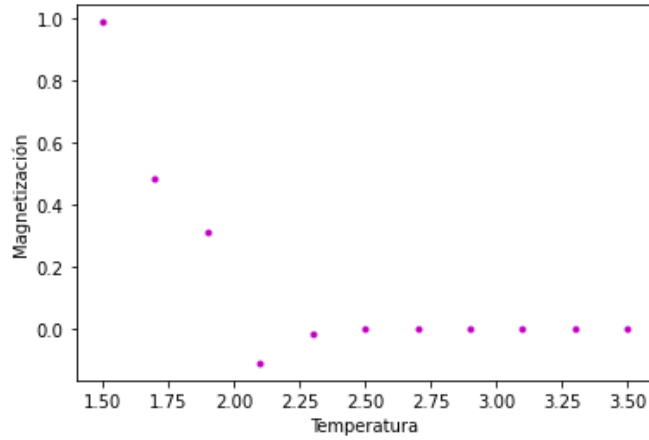


Figura 2: Ajuste cúbico

Resolviendo esta ecuación para $m_N = 0$, obtenemos los siguientes valores: $T1 = 2.32059645962016$, $T2 = 2.88107876287971$, $T3 = 3.42859077479164$. Comprobamos que nuestro resultado $T1$ se aproxima bastante a 2.269, que es el valor de T_c según el resultado exacto de Onsager. Sin embargo observamos que nuestro ajuste dista más de este valor, aunque no significativamente, que nuestra gráfica representando los propios datos. Por lo tanto, mientras la gráfica sea coherente, evitaremos realizar ajustes de ahora en adelante.

5.2. N=32



En este caso realizaremos el ajuste pues, como podemos observar en la gráfica, uno de los valores tiende más que sus consecutivos a los números negativos ,creando un mínimo relativo antes de llegar a $T=2.25$.

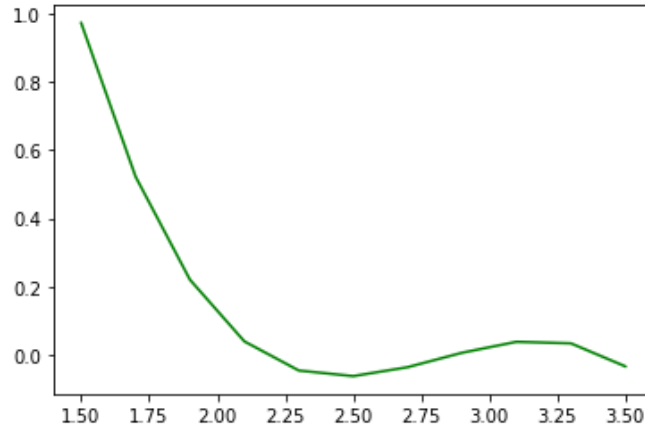
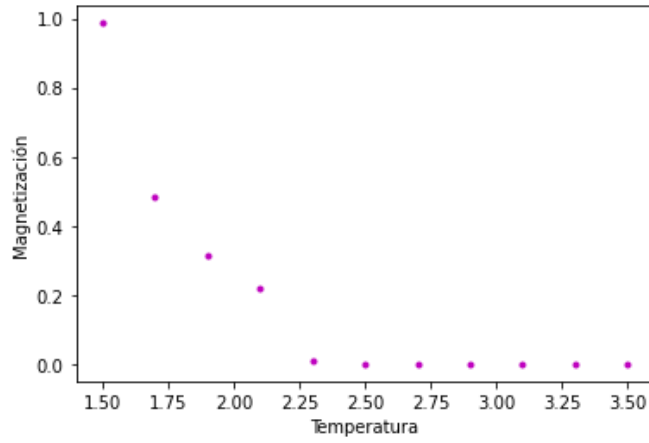


Figura 3: Ajuste cúbico

Cuya ecuación es: $m_N = AT^3 + BT^2 + CT + D$. Con: $A=-0.5485405722738$, $B=4.64481990723$, $C=-12.892642554766$, $D=11.710668980596$.

De nuevo calculamos las soluciones para $m_N = 0$, siendo estas: $T_1 = 2.32059645962016$, $T_2 = 2.88107876287971$, $T_3 = 3.42859077479164$. De nuevo T_1 es la más próxima al resultado teórico.

5.3. N=64



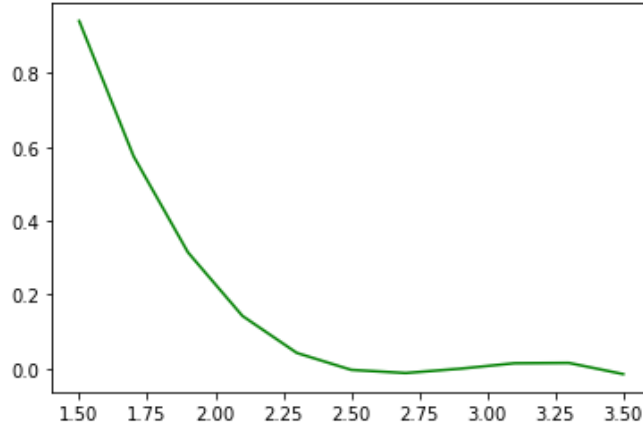
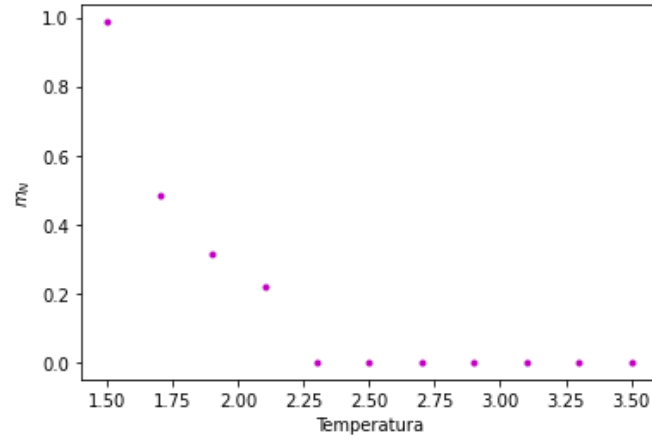


Figura 4: Ajuste cúbico

Sigue la ecuación: $m_N = AT^3 + BT^2 + CT + D$. Con $A = -0.3560873127128$, $B = 3.136993333824$, $C = -9.130069707204$, $D = 8.779126342813$.

Calculando las soluciones para $m_N = 0$, obtenemos: $T_1 = 2.47252752147$, $T_2 = 2.90713211160$, $T_3 = 3.42995874375$. Siendo T_1 la que tomaremos como T_c , pues a partir de esta vemos que nuestros datos no se alejan del 0, si no que sus valores oscilan alrededor del mismo. Una vez más, la representación gráfica de los propios datos parece acercarse más al valor exacto de T_c que el ajuste.

5.4. N=128



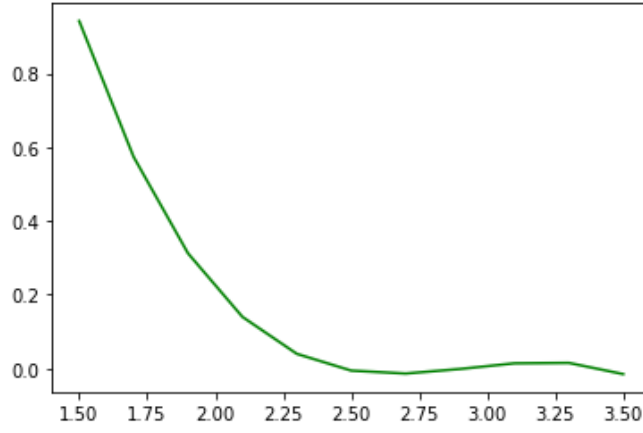


Figura 5: Ajuste cúbico

Sigue la ecuación: $m_N = AT^3 + BT^2 + CT + D$. $A = -0.3592803253049$, $B = 3.163417106139$, $C = -9.199608340122$, $D = 8.835900062375$. Los valores de T para $m_N = 0$ son: $T_1 = 2.46009668413$, $T_2 = 2.9132625214$, $T_3 = 3.43151232053$. Este caso no es diferente del resto, sigue mostrándose más próximo nuestro resultado al valor exacto de T_c en la representación de los propios datos. A medida que N tiende a valores de mayor magnitud (extrapolamos para el infinito) nuestro ajuste dista más del resultado exacto.

5.5. Calor específico

Nuestros resultados de esta forma eran menos satisfactorios, por ello realizamos los cálculos con la magnetización también. Representaremos c_N respecto a la temperatura nuevamente:

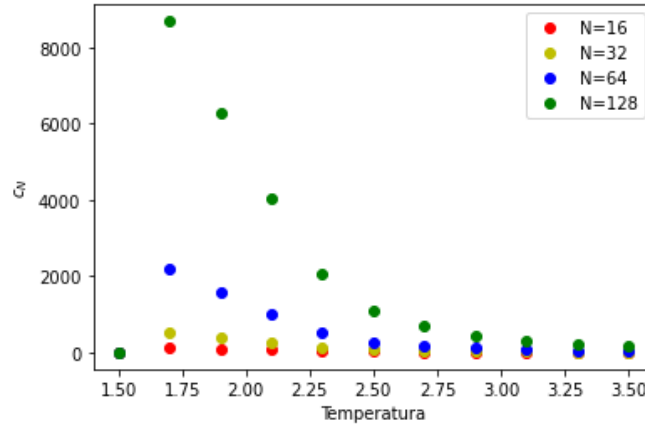


Figura 6: A simple vista observamos que el máximo no coincide con el resultado exacto para T_c

Realizaremos un ajuste cuadrático para comprobar si, de esta forma, calculando numéricamente el máximo podremos obtener un resultado similar a $T_c = 2.269$.

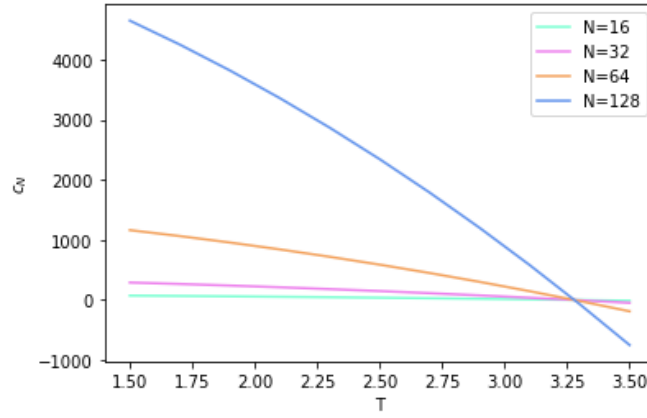


Figura 7: Con ecuación $c_N = AT^2 + BT + C$

Con coeficientes para cada N, siguiendo el orden de la leyenda:

- A=-7.4939, B=-5.0140, C= 97.1830
- A=-26.5434, B=-36.4739, C=405.1442
- A=-100.9832, B=-170.5044, C=1645.1571
- A=-393.6200, B=-731.7949, C=6632.4630

Estas funciones toman como 0 el 1.5, así que cuando despejamos de la derivada $T=B/2A$, para hallar el extremo de la función, debemos sumarle 1.5 al resultado. Por ello obtenemos, siguiendo el mismo orden que antes:

- $T_C=1.8345$
- $T_C=2.1871$
- $T_C=2.3442$
- $T_C=2.4296$

Según nuestros cálculos, a medida que aumentamos N obtenemos una mayor T_C .

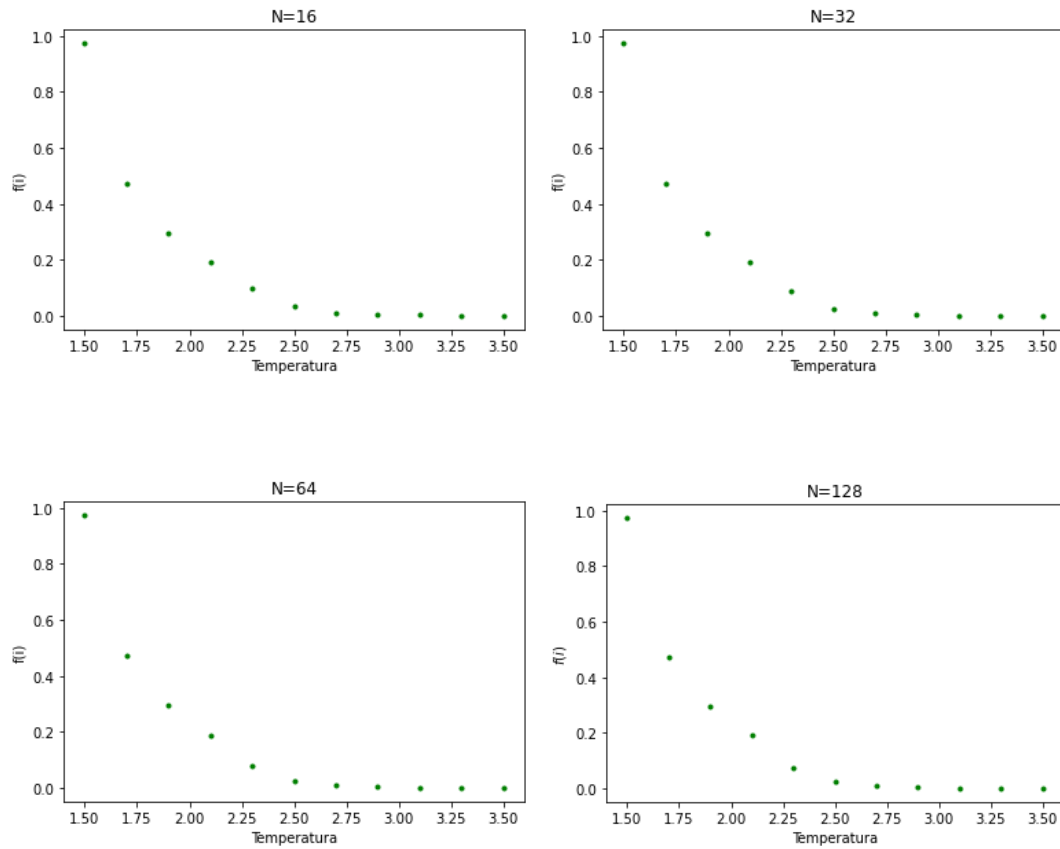
6. Exponente crítico β de la magnetización

El valor exacto del exponente crítico de la magnetización, β , en el modelo de Ising bidimensional será $\beta = \frac{1}{8 \ln(1+\sqrt{2})} = 0,142$. Se tienen en cuenta en esta ecuación las fluctuaciones y la interacción de los espines en el modelo de Ising, siendo válido en el límite termodinámico.

Se ha realizado un programa que despeja el valor de beta en función de la magnetización (según el la aproximación del apartado 4) y su correspondiente temperatura asociada, este será adjuntado con el informe. Una vez calculada numerosas veces, se realiza la media y obtenemos: $\beta_{N=16}=1.3158$, $\beta_{N=32}=1.2286$, $\beta_{N=64}=1.2167$, $\beta_{N=128}=1.2631$. Dado que se obtienen resultados coherentes, pues son similares entre ellos, Dudo si cometí un error al realizar el programa, quizá multiplicando por 10 el resultado que debería obtener, o al tomar el valor de referencia exacto, pues pude tomarlo de una fuente errónea.

7. Estudio de la función de correlación frente temperatura

Analizaremos como varía gráficamente la función $f(i)$ respecto a la temperatura para cada N. En nuestro caso, el programa se realizó con $i=5$, es decir, se calcula la correlación entre spines que distan 5 espacios.



Como podemos observar a simple vista, a penas varía según la N. Sin embargo, a bajas temperaturas la función de correlación siempre debe ser 1, pues nuestros spines están ordenados; vemos como a medida que se aumenta la temperatura nuestra "muestra de material" presenta spines cada vez más desordenados.

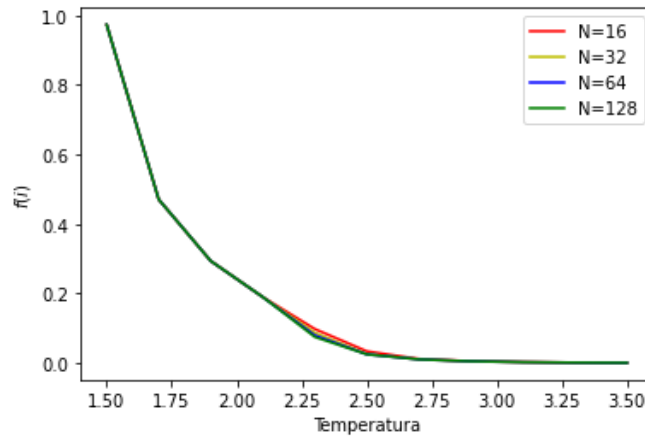


Figura 8: Los colores que no se ven están superpuestos con otros.

Realizando nuevamente sus ajustes cúbicos, obtendríamos:

- Para N=16: $f(i) = -0.3521T^3 + 3.0672T^2 - 8.8508T + 8.4766$
- Para N=32: $f(i) = -0.3554T^3 + 3.0980T^2 - 8.9395T + 8.5536$
- Para N=64: $f(i) = -0.3578T^3 + 3.1182T^2 - 8.9928T + 8.5973$
- Para N=128: $f(i) = -0.3593T^3 + 3.1308T^2 - 9.0261T + 8.6246$

Con un nuevo ajuste (adjunto) , utilizando la ley de escala (ley de potencias que interrelaciona dos variables que describen un proceso natural), obtendremos la longitud de correlación y su exponente crítico característico.

·Para $N=16$: $L=0.11327755487798061$, $\text{Exp}=5.442901653015742$.

·Para $N=32$: $L=0.11047338036755373$, $\text{Exp}= 5.500816816543267$.

·Para $N=64$: $L=0.10942025263925126$, $\text{Exp}=5.523217130367674$.

·Para $N=128$: $L=0.10877473357769098$, $\text{Exp}= 5.536868374473208$.

8. Conclusión

La teoría del campo molecular de Weiss da una descripción aproximada pero realista de las fases ferromagnéticas y paramagnéticas en el modelo de Ising, y una predicción muy simple de la temperatura de la transición de fase entre ellas, para una dimensionalidad arbitraria del cúbico celosía. Este enfoque de campo molecular permite obtener resultados analíticos aproximados para otros modelos de transiciones de fase.

En este informe se ve de forma más precisa el desorden estudiado en el trabajo obligatorio, pues este consistía en representar, mediante una animación, como se ordenaban los spines a bajas temperaturas y se desordenaban a altas temperaturas. Este aspecto del trabajo quedó nuevamente demostrado en el apartado 7.

9. Bibliografía

- Variational Principles in Classical Mechanics.University of Rochester(2023). Douglas Cline.
- <https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/69504/1054543156.2018.pdf>
- <https://www.esss.co/es/blog>