

Quinto informe de Física Computacional: Monte Carlo en el modelo de Ising 2D

Francisco Fernández

Mayo del 2020

Resumen

En el siguiente trabajo se estudia el modelo de Ising en una grilla bidimensional, sin campo externo aplicado y a través del algoritmo de Metropolis. Se logró analizar el comportamiento de distintas cantidades en función de los pasos de Monte Carlo (MCS) y se estudiaron distintas propiedades termodinámicas en función de la temperatura. Se determinó la temperatura de Curie mediante el cumulante de Binder para distintos tamaños del sistema y se observó la tendencia cerca de la misma para la magnetización y la susceptibilidad magnética.

1. Introducción teórica

1.1. Modelo de Ising

El modelo de Ising fue desarrollado para explicar la transición de fase de segundo orden que se da en los materiales ferromagnéticos; en los cuales para temperaturas bajas los espines están alineados en dominios, generando una magnetización no nula, pero por encima de la temperatura de Curie el sistema de espines se encuentra desordenado y la magnetización se anula. En este informe se estudiará este problema para una grilla de dos dimensiones, para cuyo caso el Hamiltoniano del sistema puede escribirse como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad (1)$$

donde J es la energía de intercambio, y puede tomar tanto valores positivos (caso ferromagnético) como negativos (caso antiferromagnético), y s_i es el *espín* que puede tomar valores ± 1 . $\langle i, j \rangle$ significa que sólo se considera la interacción a primeros vecinos.

En las simulaciones termodinámicas que se realizarán en este trabajo se mantendrán constantes la temperatura T , el volumen V y el número de partículas N ; esto quiere decir que la energía total del sistema y la magnetización podrán fluctuar. Cada estado α_k con energía E_{α_k} tiene una probabilidad dada por la distribución de Boltzmann,

$$\mathcal{P}(E_{\alpha_k}, T) = \frac{\exp(-E_{\alpha_k}/k_B T)}{Z(T)}, \quad Z(T) = \sum_{\alpha_k} \exp(-E_{\alpha_k}/k_B T),$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y $Z(T)$ la función partición.

1.2. Algoritmo de Metropolis

En el algoritmo desarrollado por Metropolis se genera una secuencia de estados, que es una cadena Markoviana, para simular las fluctuaciones que ocurren durante la equilibración térmica.

Este algoritmo puede resumirse en los siguientes pasos

1. Se tiene una configuración de espines $\alpha_k = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ a una temperatura dada T .
2. Se genera una configuración de prueba en la cual se le cambia el signo a algún espín i .
3. Se calcula el ΔE que se generaría.
4. Si $\Delta E < 0$, se acepta el cambio y se modifica el estado α_k .
5. Si $\Delta E > 0$, se acepta con probabilidad relativa $\mathcal{R} = \exp(-\Delta E/k_B T)$; para ello se sortea un número aleatorio $0 < r_i < 1$, si $r_i \leq \mathcal{R}$ se acepta y si no se rechaza.

Este proceso se vuelve a repetir hasta que se hayan probado el cambio de signo de los N espines. Luego, se cuenta un paso de Monte Carlo (MCS, de sus siglas en inglés, *Monte Carlo Step*).

1.3. Propiedades termodinámicas

Antes de ver cómo calcular algunas cantidades termodinámicas, cabe aclarar que las simulaciones de Monte Carlo introducen una dinámica artificial, por lo que no se puede confiar en la evolución que sigue el sistema si no en los valores medios de distintos observables que dependen del ensamble en el que se trabaja. Para este problema podemos medir la energía interna del sistema

$$U(T) = \langle E \rangle,$$

donde el promedio se realiza sobre distintas configuraciones en equilibrio y la energía se obtiene calculando el Hamiltoniano (1); en el caso de que todos los espines estén alineados para arriba, o para abajo, la energía es igual a $-2JN$.

Por otro lado, la magnetización viene dada por

$$M = \sum_{i=1}^N s_i,$$

de la cual también se puede obtener, realizando distintas mediciones, $\langle M \rangle$. Para el caso en el que los espines están ordenados la magnetización puede valer $\pm N$ y en el caso en que están desordenados los términos de la sumatoria se anulan y $M \rightarrow 0$.

Ambas variables se van a presentar normalizadas, es decir, divididas por el número total de partículas N .

Si bien de la termodinámica sabemos que el calor específico C_V a volumen constante puede calcularse como

$$C_V = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT},$$

en este caso es conveniente obtenerlo utilizando las fluctuaciones de la energía que se observan cada vez que se mide

$$C_V = \frac{1}{Nk_B T^2} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2];$$

en el límite termodinámico esta propiedad se comporta como

$$C_V \propto |T - T_c|^{-\alpha},$$

donde α es el exponente crítico y $T_C \simeq 2,2692$, la temperatura de Curie.

Análogamente, la susceptibilidad magnética se puede obtener a partir de las fluctuaciones de la magnetización

$$\chi = \frac{1}{Nk_B T} [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2],$$

que en el límite termodinámico se comporta como

$$\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma},$$

donde γ es el exponente crítico.

Por último, se introducen los cumulantes de Binder, U_L , que relacionan el momento de cuarto orden de la magnetización con el de segundo orden de la siguiente manera

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2},$$

donde m es la magnetización normalizada. Analizando la variación de esta cantidad se puede saber si el L es adecuado y si se tienen, o no, efectos de tamaño finito. Si L es lo suficientemente grande se tiene que cumplir que para $T > T_C$

$$U_L \sim \frac{1}{L^d},$$

y, para $T < T_C$,

$$U_L \rightarrow \frac{2}{3}.$$

Además de esto se puede estimar el valor de T_C , aunque sin demasiada precisión.

2. Resultados y discusiones

En esta sección se discutirán los resultados obtenidos para el modelo de Ising ferromagnético en 2-D, con campo externo nulo y condiciones periódicas de contorno para grillas de distinto tamaño, 10x10, 20x20, 40x40 y 128x128. Para esto se escribieron distintos módulos en Fortran, que utilizan el módulo de precisión, `precision.f90`, y el de números aleatorios introducido en el informe anterior, `randomnum.f90`. En el primero de ellos, `initial_cond.f90`, se definen las variables globales que usaran el resto de los módulos y que se les asignarán valores en el `main.f90`, tiene dos subrutinas para darle condiciones iniciales a los espines correspondientes al sistema en $T_0 \rightarrow 0$, dónde el sistema se encuentra ordenado, y $T_0 \rightarrow \infty$, con espines aleatorios. Por otro lado, en `calculate.f90`, se tienen las subrutinas que calculan la energía y la magnetización total del sistema y el cambio de energía si se le cambia el signo a un espín, todas ellas con condiciones periódicas de contorno. El algoritmo de Metropolis se implementa en los programas principales en cada uno de los incisos.

2.1. Inciso a

Lo primero que se realizó fueron mediciones de la energía y la magnetización en función de los pasos de MC, siendo esta de mayor importancia, ya que su medición en laboratorios es directa, no así la energía. En este caso se consideró un valor del largo de la grilla fijo en $L = 40$. En la figura (1) se muestran, para los primeros 150 MCS, estas magnitudes para una temperatura $T = k_B T / J = 2,0$. Se puede observar que para la condición inicial favorable a la temperatura, que es la que se corresponde con todos los espines alineados en +1, estas

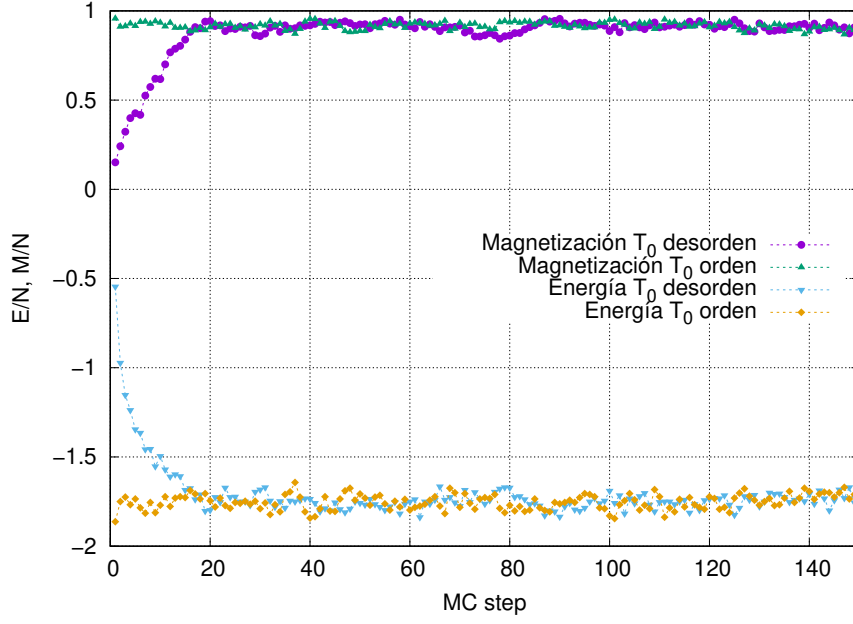


Figura 1: Energía y magnetización normalizada en función de pasos de 150 pasos de MC para $T = 2,0$.

magnitudes comienzan prácticamente equilibradas; pero si se les da un signo aleatorio a los espines, entonces al sistema le toma, aproximadamente, unos 20 pasos de MC equilibrarse. Cabe destacar que el valor esperado para la magnetización es $+1$, pero da ligeramente menor ya que la probabilidad de que un espín cambie de signo es distinta de cero y se forman pequeños dominios con espines invertidos, que se encuentran separados por contornos que minimizan su energía y que se toman varios pasos hasta que algún signo domine. Lo mismo influye en que la energía no sea exactamente igual a -2 , en este caso en el que $J = 1$.

En la figura (2) se pueden apreciar las fluctuaciones de la magnetización y la energía para los primeros 150 pasos de MC con una temperatura igual a $3,3$. También observamos como al

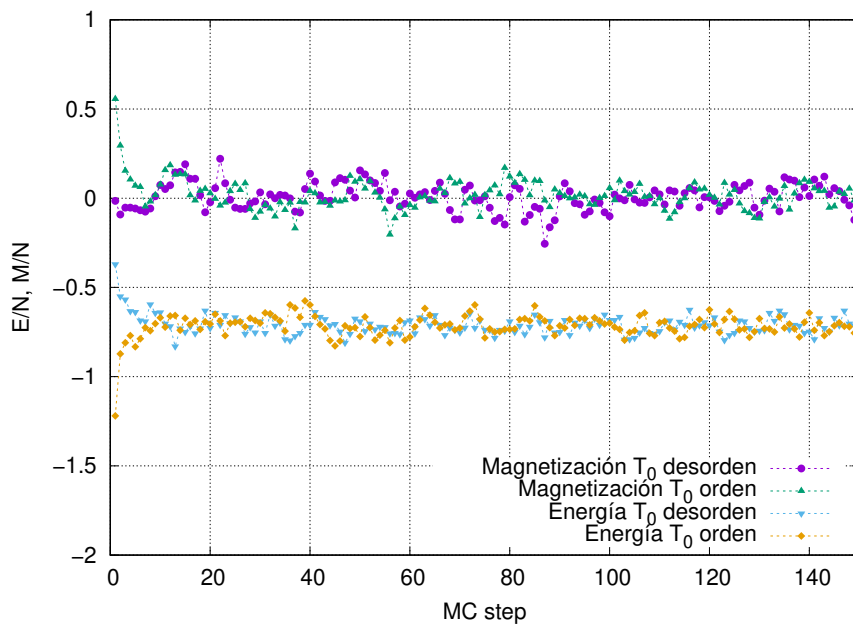


Figura 2: Energía y magnetización normalizada en función de pasos de 150 pasos de MC para $T = 3,3$.

sistema le toma unos 20 pasos equilibrar. La magnetización fluctúa al rededor de 0, ya que los espines se encuentran en pequeños dominios de distintos signos y estos van cambiando pero la suma total se mantiene siempre cercana a 0, porque a esta temperatura los mismos tienden a estar antiparalelos.

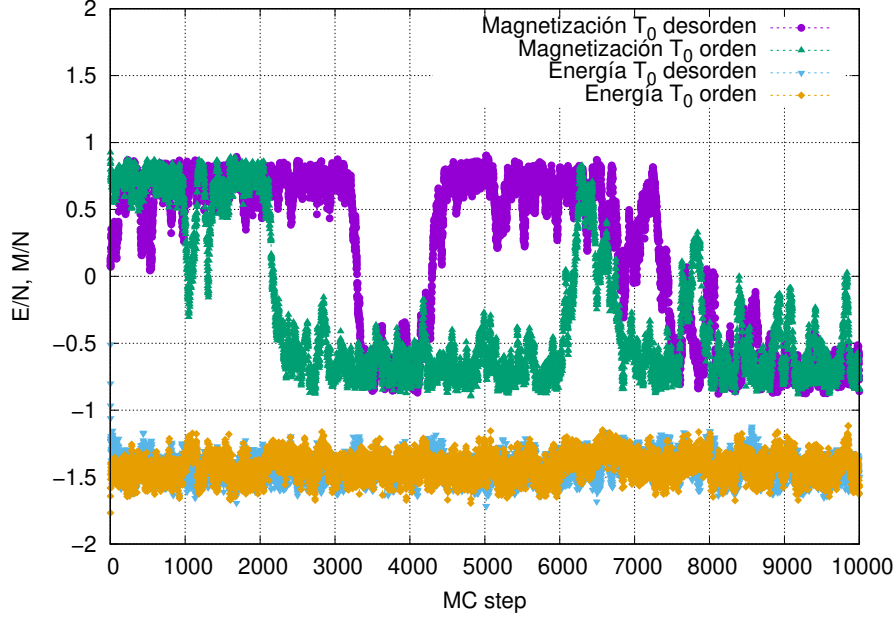


Figura 3: Energía y magnetización normalizada en función de pasos de 10^4 pasos de MC para $T = 2,2676$.

Por último, se analizó una temperatura cercana a la de Curie, los resultados obtenidos se presentan en la figura (3). Lo primero que se puede destacar es que, en los 10^4 MCS, la energía fluctúa, para ambas condiciones iniciales, al rededor del mismo valor. Por otro lado, se observa como la magnetización fluctúa al rededor de $\pm 0,8$, tomando alguno de los dos signos según el intervalo que se tenga. Para poder explicar mejor este efecto se visualizaron las configuración, con un *script* de **gnuplot**, graficadas cada 100 pasos de MC, se puede destacar que se observa como los espines cambian de signo en dominios completos. Consultando la bibliografía se puede agregar que este es un efecto de tamaño finito, ya que los sistemas reales, que se observan en laboratorios, necesitan una cantidad infinita de energía libre para cambiar el signo de la magnetización en una grilla infinita, y esto es imposible que ocurra. En este caso, en el que $L = 40$, la barrera de energía para que este cambio de magnetización suceda es finita, debido a que las barreras que separan a los dominios lo son, por lo tanto la probabilidad de intercambiar los signos es distinta de cero y el sistema puede fluctuar entre ambos estados.

2.2. Inciso b

Para todos los gráficos presentados en este inciso se realizó un loop en temperaturas en el intervalo $[0.5 T_C, 1.5 T_C]$, tomando datos cada, aproximadamente, $0.009 T_C$ (si estuviera en $T^* = k_B T/J$, esto equivaldría a un paso de 0,02), comenzando en la temperatura más baja y haciendo un *heating* hacia las temperaturas altas. Para obtener una buena exploración de las configuraciones y una buena estadística para calcular propiedades termodinámicas del sistema, se realizaron 10^6 MCS, de los cuales los primeros 10^4 fueron de equilibración y en los siguientes se tomaron mediciones cada 100 pasos.

En la figura (4) se observa como la energía por espín para distintos tamaños de grilla se comporta de la misma manera, resultando igual a -2 para temperaturas bajas, donde el sistema se

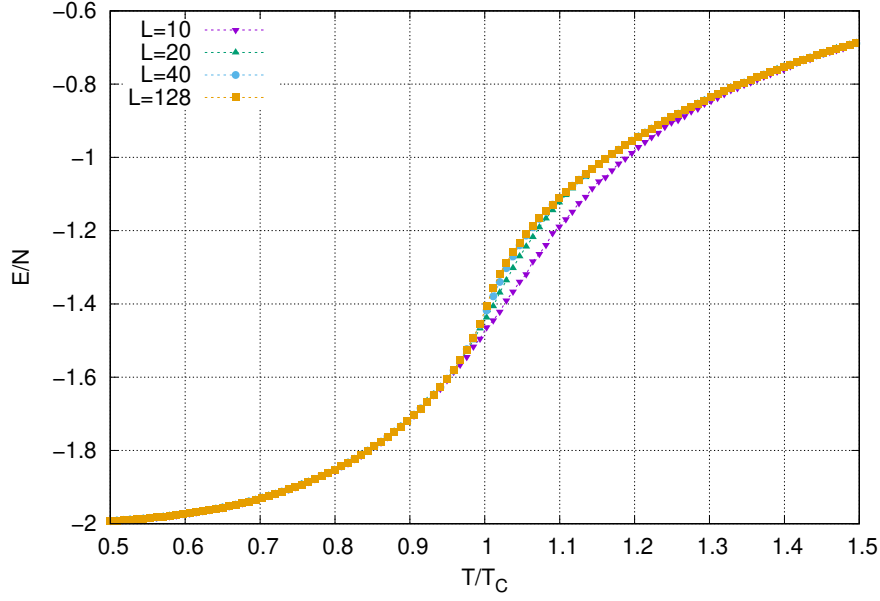


Figura 4: Energía normalizada en función de T/T_C para distintos tamaños de la grilla.

encuentra con sus espines alineados, y aumentando cualitativamente como una $\tanh(T/T_C)$ a medida que los espines del sistema toman valores aleatorios.

Los valores de la magnetización en función de T/T_C se muestran en la figura (5), puede destacarse que para tamaños pequeños, $L = 10$ o 20 , por ejemplo, la misma oscila entre valores tanto positivos como negativos para valores de $T < T_C$. Incluso para $L = 128$, para los valores más próximos a T_C , la magnetización se anula y esto se debe a las fluctuaciones entre ± 1 , resultando en un promedio nulo para tiempos largos. Para solucionar este problema podrían realizarse gráficos análogos al presentados en la figura (3) para distintas temperaturas y realizar mediciones solo en aquellos lugares donde la magnetización es cercana a $+1$, como este es un trabajo arduo de realizar se optó por ir acumulando el valor del módulo de la magnetización de manera conjunta, obteniéndose los gráficos que se muestran en la figura (6). Esta es una

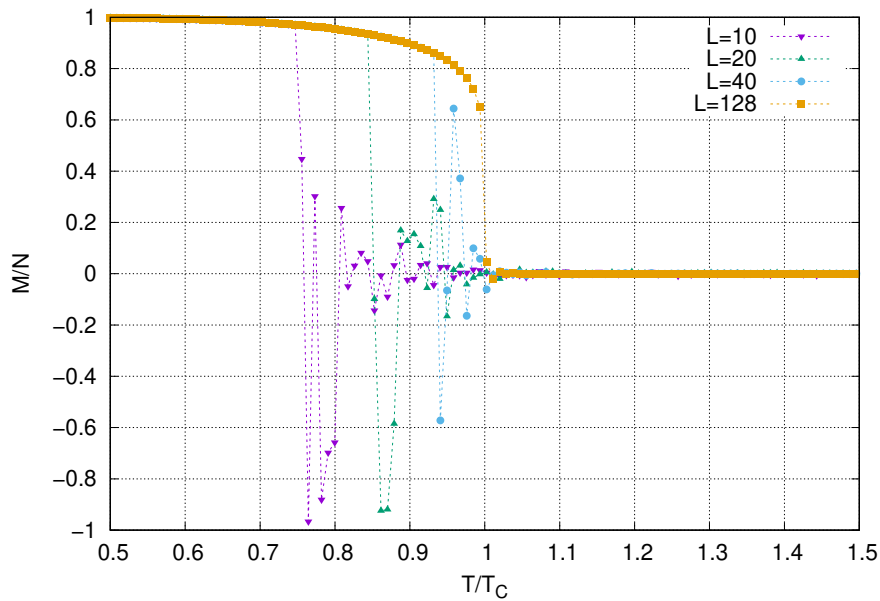


Figura 5: Magnetización normalizada en función de T/T_C para distintos tamaños de la grilla.

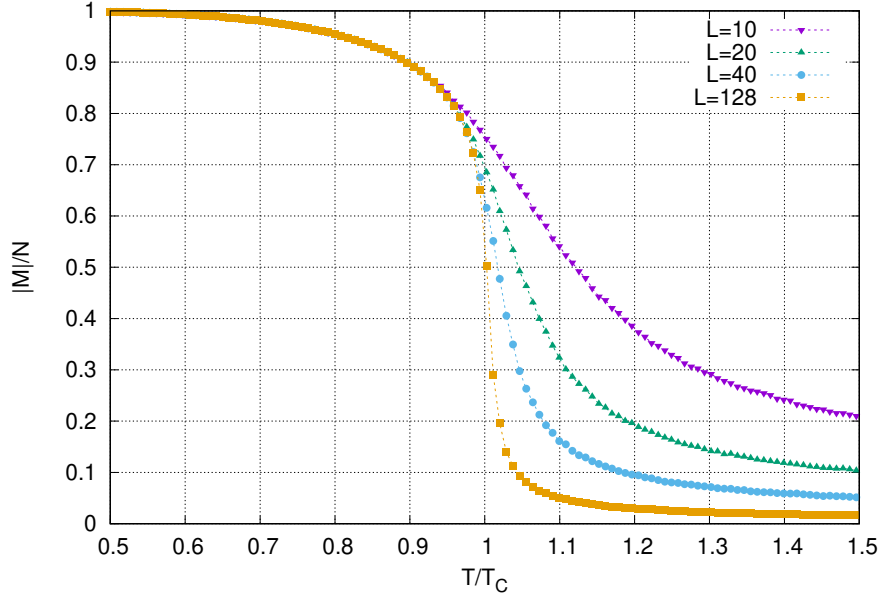


Figura 6: Módulo de la magnetización normalizada en función de T/T_C para distintos tamaños de la grilla.

restricción de los dos posibles valores que puede tomar la magnetización, que serán analizados con mayor detalle en el siguiente inciso. De esta manera, se puede observar como a medida que el tamaño del sistema aumenta, el gradiente del módulo de la magnetización se hace mayor en torno de la región a T_C , evidenciando la presencia de la transición de fase de segundo orden. Aunque, por otro lado, para los distintos tamaños de la grilla se obtienen los mismos resultados cualitativos, para temperaturas altas domina la entropía y el sistema prefiere estar desordenado, y para temperaturas bajas pasa lo contrario, el sistema tiende a un orden.

En la figura (7) se muestra el calor específico en función de T/T_C para los distintos tamaños estudiados, puede apreciarse como a medida que L aumenta el ancho de la curva disminuye, aumentando consigo la altura del pico y desplazando su centro a valores, por derecha, más

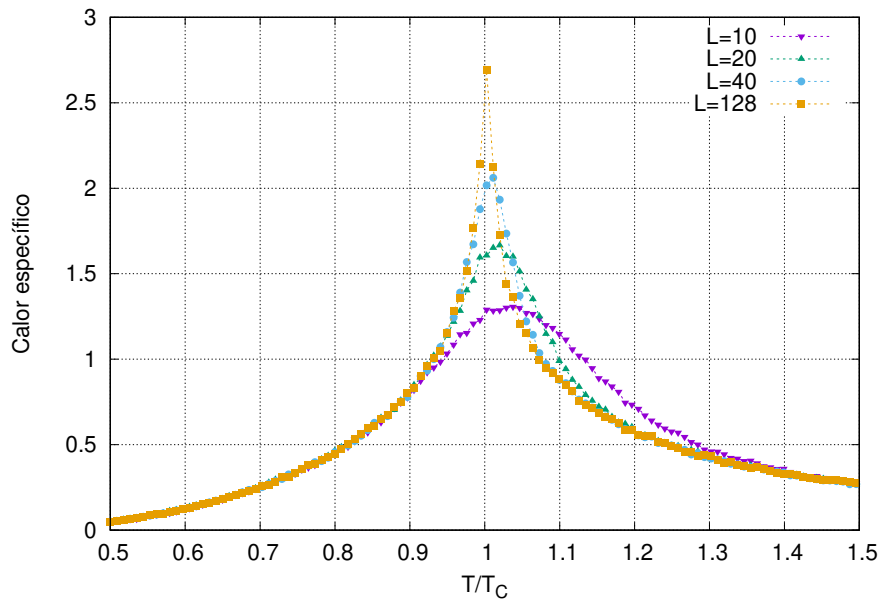


Figura 7: Calor específico en función de T/T_C para distintos tamaños de la grilla.

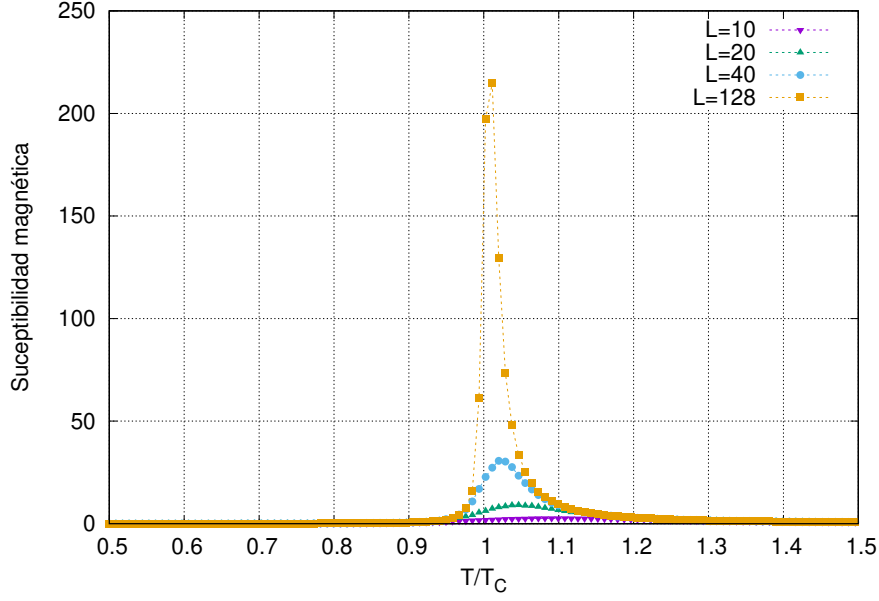


Figura 8: Suseptibilidad magnética en función de T/T_C para distintos tamaños de la grilla.

cercanos a 1. Aproximadamente, para $L = 10$ el máximo se encuentra en 1,04, para $L = 20$ en 1,02, para $L = 40$ en 1,01 y, llegando, para $L = 128$ a un valor igual a 1,00, donde el error de cada uno de estos valores es igual a la distancia entre los puntos, $\sim 0,009$. Un comportamiento análogo se observa para la suseptibilidad magnética en la figura (8).

2.3. Inciso c

Para obtener histogramas de magnetización se utilizaron 201 *bins*; ya que M/N puede tomar valores entre ± 1 , se multiplican los mismos por 100 y se va acumulando la cantidad de veces que aparece ese *bin*, por último se lo normaliza por la cantidad de *bines*. A continuación se mostrarán los mismos para dos temperaturas, una por debajo y otra por encima de 1, para 10^6 MCS, de los cuales 10^4 fueron de equilibración y luego se acumularon los valores cada 100 pasos. En el caso en que $T/T_C = 0,8$ (ver figura 9) puede verse como para $L = 10$, o 20, la

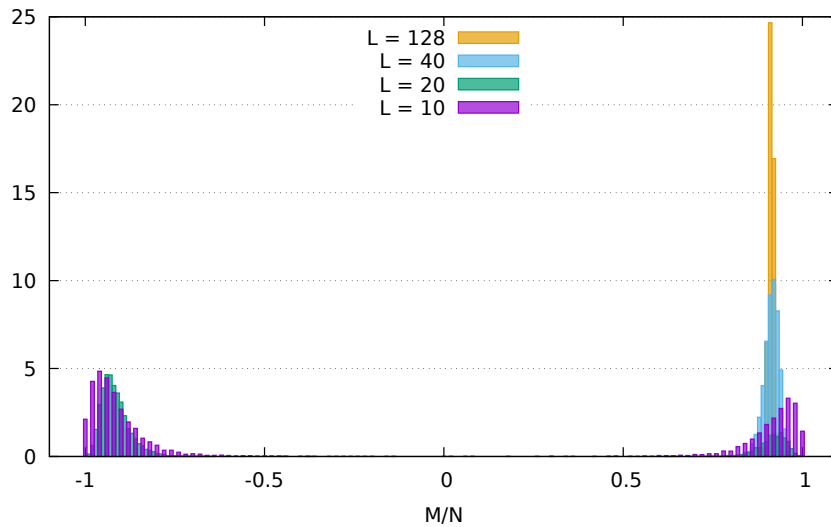


Figura 9: Histograma de la magnetización normalizada para $T/T_C = 0,8$, para distintos tamaños de la grilla.

magnetización se divide en dos picos, siendo la altura aproximadamente la misma, esto se debe a que para estos casos la probabilidad de que haya un salto en la magnetización para estos tamaños y esta temperatura es distinta de 0. Para valores más grandes, $L = 40$ o 128 , en la cantidad de mediciones tomadas, no se observó salto de un extremo al otro. Como último, se puede agregar que los picos están centrados en $\pm 0,9$, desplazándose ligeramente hacia valores menores cuando disminuye L . Por otro lado, para $T/T_C = 1,15$ (ver figura 10), se observa como hay un solo pico de magnetización, centrado en 0 para los distintos tamaños, y que su ancho va disminuyendo a medida que L aumenta. (Hay un decaimiento en el bin correspondiente a 0 para tamaños de $L = 20$ y 40 que no sé a que adjudicárselo, también el histograma para $L = 10$ no es apreciable en comparación al resto; cabe aclarar que se realizaron los cálculos con el mismo programa).

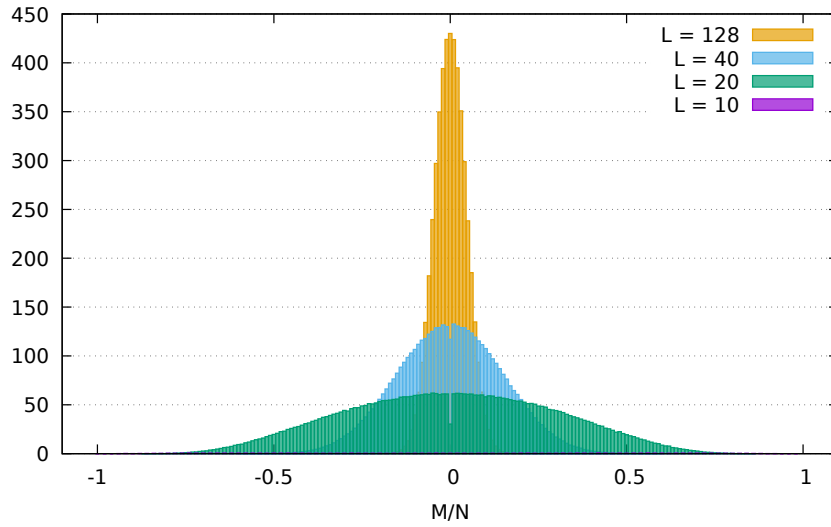


Figura 10: Histograma de la magnetización normalizada para $T/T_C = 1,15$, para distintos tamaños de la grilla.

Este análisis fue otra forma de evidenciar la transición de fase a partir de la magnetización. Si se pensara en lo que sucede cuando se le agrega un término del campo magnético al Hamiltoniano (1), dependiendo de la dirección que se le diera, se vería favorecida alguna de las dos direcciones del espín, desbalanceando la altura de los picos para ± 1 en la figura (9) y transformando la transición de fase de segundo orden a una de primer orden.

2.4. Inciso d

En la figura (11) podemos observar la variación del culumante de Binder con la temperatura para distintos tamaños del sistema. Puede destacarse que para temperaturas menores a la de Curie el culumante de Binder tiende a una constante igual a $2/3$, concordando con lo que se espera de la teoría. Por otro lado, para temperaturas mayores a T_C , vemos como el mismo decae, siendo este decaimiento más abrupto a medida que se consideran tamaños mayores. Una de las ventajas de estas curvas es que se puede determinar de manera numérica el valor de T_C , observando donde se cruzan las curvas para distintos tamaños de grilla, esto se presenta en la figura (12), donde la línea vertical representa el centro del intervalo entre los puntos medidos, donde se adjudica el valor de la temperatura de Curie, con una incertidumbre igual a la distancia a las mediciones, resultando $T_C^{num} = (0,998 \pm 0,004)T_C^{teo}$; cabe destacar que el valor teórico está contemplado dentro de la incertidumbre numérica.

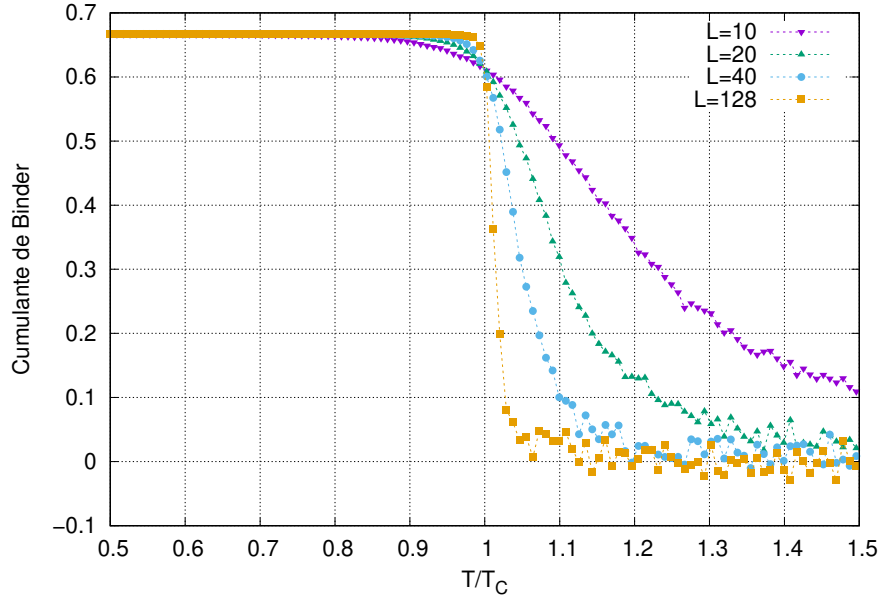


Figura 11: Cumulantes de Binder en función de T/T_C para distintos tamaños de la grilla.

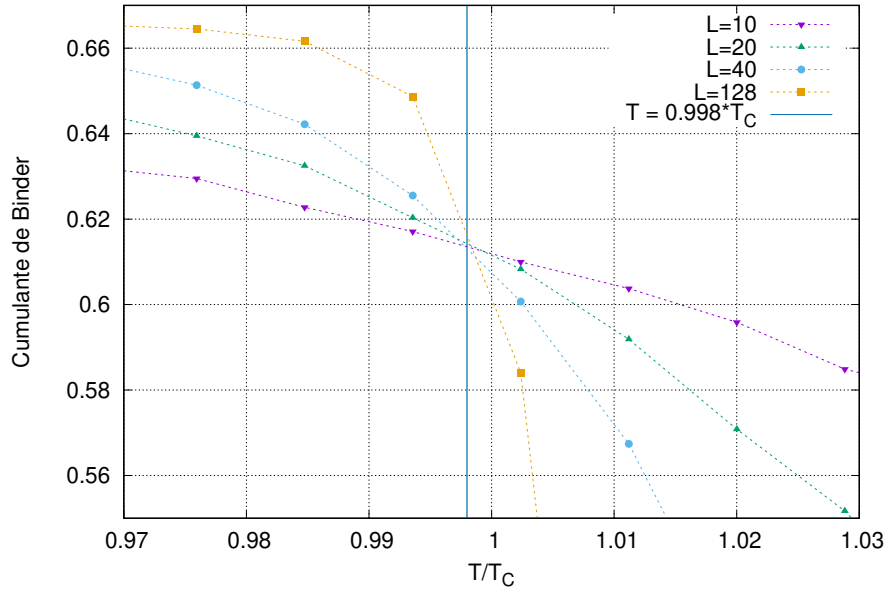


Figura 12: Determinación de T_C a partir de los cumulantes de Binder.

En la figura (13) se presenta el módulo de la magnetización en función de $|1 - T/T_C|$ para un tamaño de 128×128 , también se gráfica la tendencia esperada con un exponente crítico igual a $1/8$. A simple vista puede decirse que el error en el intervalo $[0, 0.05]$ es menor al 10 %. De manera análoga, se grafica la susceptibilidad magnética, para el mismo tamaño de la grilla, en función de $|T/T_C - 1|$ y se agrega la curva teórica esperada, con un exponente crítico igual a $-7/4$, y se observa como, cualitativamente, concuerda este decaimiento con los puntos obtenidos de manera numérica.

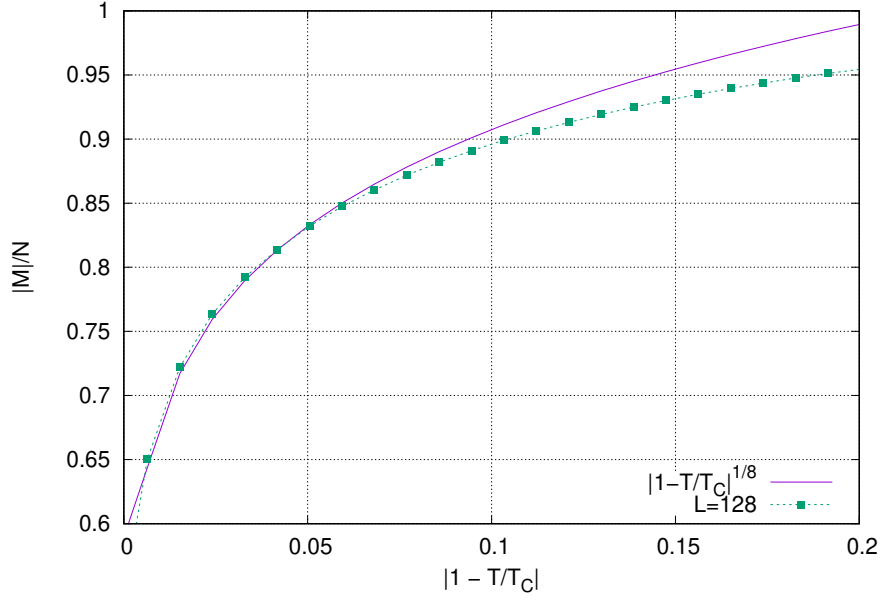


Figura 13: Exponente crítico de la magnetización.

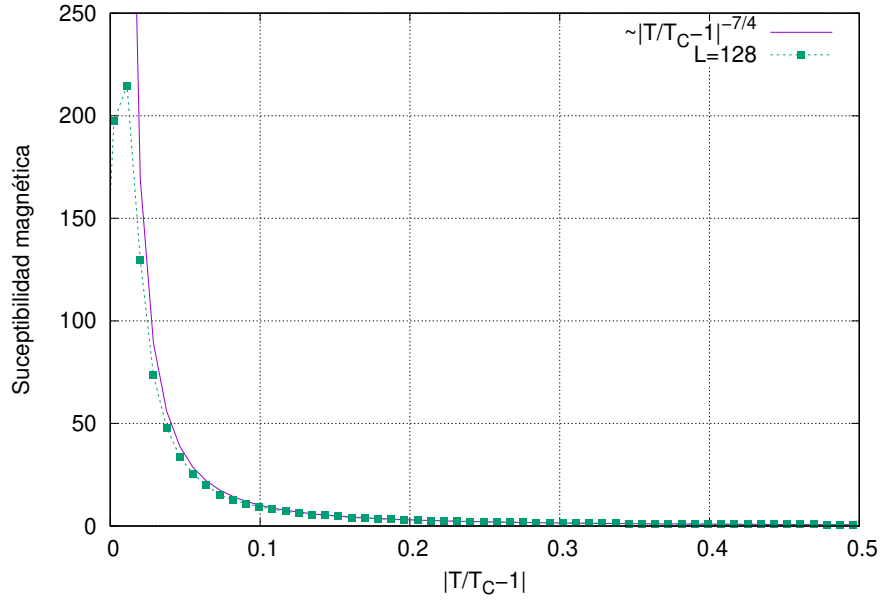


Figura 14: Exponente crítico de la susceptibilidad magnética.

2.5. Inciso e

Si se calculara la función de autocorrelación de la energía y el módulo de la magnetización, para distintas temperaturas, se podría estimar los tiempos de correlación, τ_c . Este cambiaría en función de la temperatura, siendo mayor para aquellas más cercanas a T_C , influyendo en las barras de error de las mediciones, que, para un observable A , depende de la siguiente forma

$$\varepsilon_A = \sigma_A \sqrt{\frac{2\tau_c}{\text{mediciones}}},$$

donde σ_A es la varianza. En la figura (15) se observa el módulo de la magnetización en función de T/T_C , para un tamaño de 10x10, utilizando un $\tau_c = 400$, que fue el valor que se discutió las clases prácticas. Puede destacarse que para valores bajos de temperatura las barras de error

son del tamaño del punto del gráfico, pero van aumentando a medida que nos acercamos a T_C , incluso, para algunos puntos, las barras de error superan el rango de valores posibles de la magnetización, luego, para temperaturas mayores a T_C , el tamaño de las barras de error comienza a disminuir.

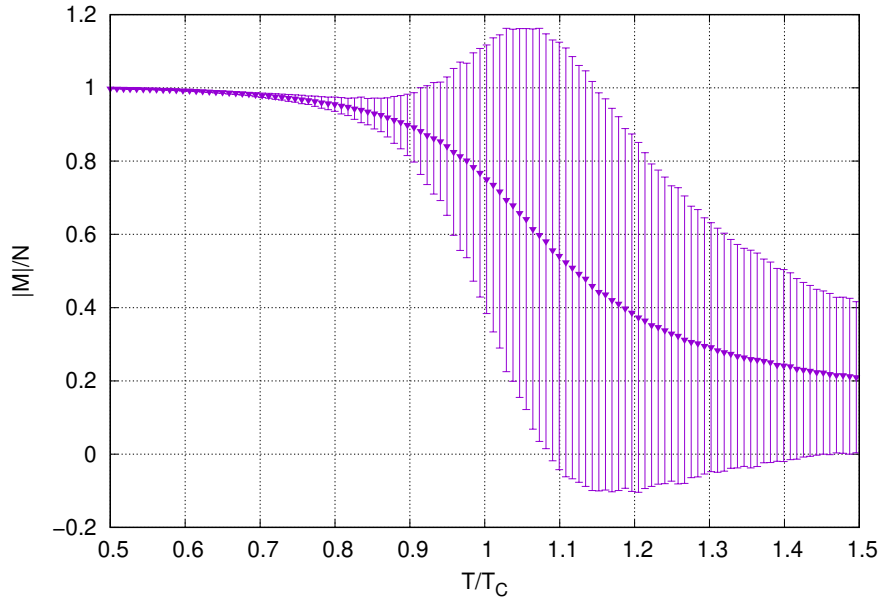


Figura 15: Módulo de la magnetización normalizada en función de T/T_C para un tamaño de grilla igual a 10×10 .