

Modello di Ising su reticolo esagonale

Ludovico Iannello e Federico Fattorini

22 ottobre 2023

1 Introduzione

Si vuole studiare il comportamento di varie quantità termodinamiche di un sistema descritto dal modello di Ising a primi vicini su reticolo esagonale, ovvero con variabili di spin collocate sui 6 vertici di un esagono regolare. Per lo studio della termodinamica viene usato un metodo Montecarlo con l'implementazione dell'algoritmo Metropolis. In particolare verrà evidenziato il comportamento in vicinanza della transizione di fase del secondo ordine prevista dalla teoria, al variare della temperatura e del volume del reticolo. La transizione è prevista ad una temperatura critica T_c alla quale corrisponde $\beta_c = \frac{1}{k_b T_c} = \frac{1}{2} \log(2 + \sqrt{3}) \approx 0.6585$ dove si è considerato $k_b=1$. La soluzione esatta del modello di Ising su reticolo esagonale, insieme al valore β_c usato come valore teorico in questo lavoro, può essere trovato in [2].

2 Cenni teorici

L'hamiltoniana del modello di ising è:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

dove nel caso in analisi è stato posto $h=0$, ovvero sistema in assenza di campo magnetico, mentre $J > 0$. Il comportamento attorno alla temperatura critica è descritto dai cosiddetti esponenti critici che descrivono come variano alcune quantità termodinamiche intorno a T_c in funzione della temperatura ridotta $t \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$:

$$\begin{aligned} \langle \xi \rangle &\sim |t|^{-\nu} \\ \langle M \rangle &\sim |t|^\beta \text{ per } T < T_c \\ \chi &\equiv \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} \propto V(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \sim |t|^{-\gamma} \\ C &\equiv \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} \propto V(\langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2) \sim |t|^{-\alpha} \end{aligned}$$

dove nel caso del reticolo esagonale $V = 2L^2$ (L lunghezza del reticolo), $M = \sum_i \frac{S_i}{V}$ è la densità di magnetizzazione, $\epsilon = \frac{E}{V}$ è la densità di energia, C è il calore specifico e χ è la suscettività magnetica. Esprimendo tutto in funzione della lunghezza di correlazione ξ si ha:

$$\langle M \rangle \sim |\xi|^{-\beta/\nu}$$

$$\chi \sim |\xi|^{\gamma/\nu}$$

$$C \sim |\xi|^{\alpha/\nu}$$

Indipendentemente dalla struttura del reticolo, per il modello di Ising in 2 dimensioni gli indici critici previsti dalla teoria sono:

$$\nu = 1, \quad \beta = \frac{1}{8}, \quad \gamma = \frac{7}{4}, \quad \alpha = 0$$

3 Implementazione del reticolo

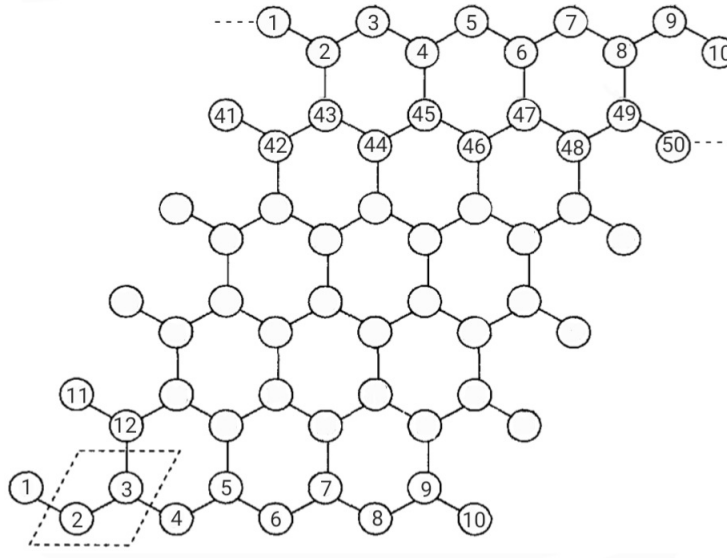


Figura 1: Ordinamento dei siti del reticolo esagonale per $L=5$.

Seguendo la trattazione in [1], i singoli siti del reticolo sono stati indicizzati in unico array di lunghezza V , con valori da 1 a V , nella maniera mostrata nella figura. Per tener conto dell'interazione con i primi vicini sono state usate le seguenti relazioni:

- se l'indice i del sito è pari i primi vicini sono: $i \pm 1$ e $i - 2L + 1$
- se l'indice i del sito è dispari i primi vicini sono: $i \pm 1$ e $i + 2L - 1$

Sono state implementate dunque condizioni al contorno elicoidali e si è considerata l'ultima fila del reticolo come fila precedente alla prima, e viceversa.

4 Descrizione delle simulazioni

Sono state eseguite simulazioni al variare di 50 valori di beta ($0.5 \leq \beta \leq 0.8$), per diversi volumi del reticolo. Per ogni simulazione il sistema è stato fatto termalizzare, poi sono state misurate la densità di energia (ϵ) e il modulo della magnetizzazione ($|M|$ in quanto per un reticolo finito l'algoritmo Metropolis può oscillare tra le due configurazioni completamente ordinate, dando una

magnetizzazione media nulla anche nella fase ordinata, ovvero per $\beta > \beta_c$) della particolare configurazione intervallando le misure di un certo numero di step del Metropolis. Successivamente sono state calcolate per ogni simulazione le seguenti quantità:

$$\bar{M} = \sum_{i=1}^N \frac{|M_i|}{N}$$

$$\bar{\epsilon} = \sum_{i=1}^N \frac{\epsilon_i}{N}$$

$$\bar{\chi} = \beta V (\langle \bar{M}^2 \rangle - \langle \bar{M} \rangle^2)$$

$$\bar{C} = \beta^2 V (\langle \bar{\epsilon}^2 \rangle - \langle \bar{\epsilon} \rangle^2)$$

dove M_i e ϵ_i sono le misure eseguite su ogni configurazione e N è il numero di misure per ogni valore di β . L'errore su ogni singola misura è stato determinato utilizzando l'algoritmo bootstrap per il caso di dati correlati.

5 Grafici

Si riportano quindi i grafici ottenuti dalle misure descritte precedentemente.

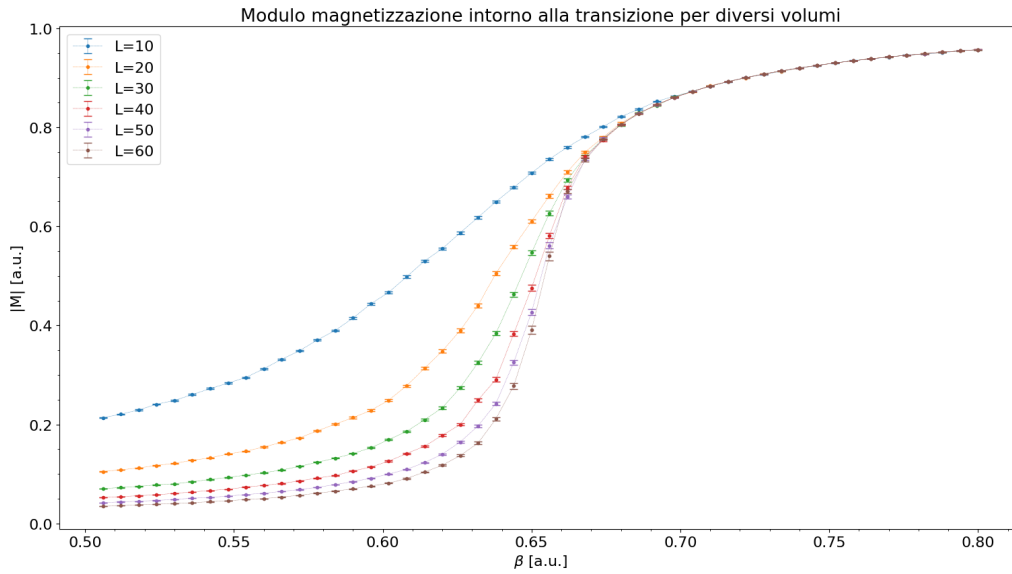


Figura 2: Modulo della magnetizzazione al variare di β per differenti valori di L .

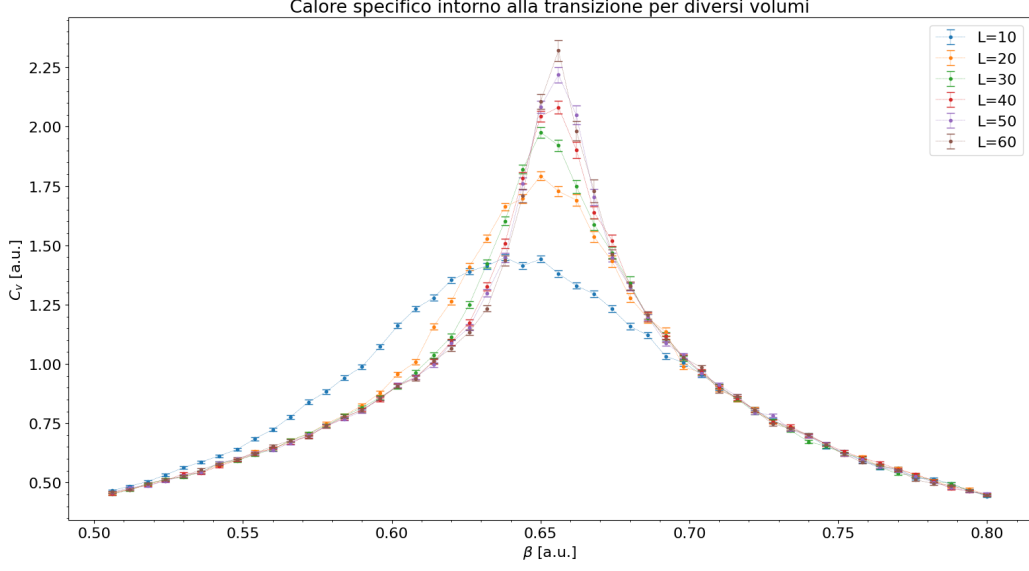


Figura 3: Calore specifico al variare di β per differenti valori di L .

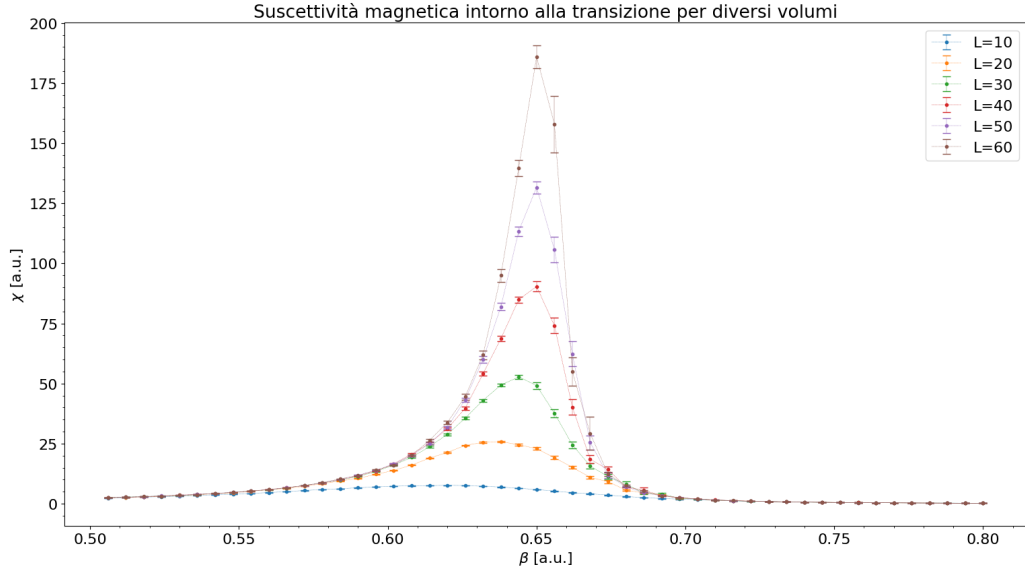


Figura 4: Suscettività al variare di β per differenti valori di L .

Dal grafico della suscettività si evince come non compaia nessuna divergenza alla temperatura critica (come ci si aspettava dall'andamento $\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}$) a causa del fatto che il reticolo è finito e che quindi ξ non può divergere ma può assumere al massimo il valore della lunghezza del reticolo L . Si nota infatti che al crescere di L si ha un aumento anche del massimo della suscettività e gli effetti di size finito risulteranno essere meno rilevanti. Inoltre il massimo non si ha per $\beta = \beta_c$ sempre a causa degli effetti di size finito; infatti, essendo in numero minore gli spin, si raggiunge prima la fase ordinata.

6 Distribuzione della magnetizzazione

La distribuzione della magnetizzazione presenta due andamenti diversi a seconda che il sistema si trovi sopra o sotto la transizione di fase. Nella fase disordinata, sarà infatti distribuita in modo gaussiano attorno allo 0; al contrario, nella fase ordinata (sempre per volume finito), si avranno due picchi disgiunti, corrispondenti alla due configurazioni completamente ordinate. Infatti teoricamente il sistema dovrebbe rimanere in una delle due configurazioni completamente ordinate e quindi dare un picco unico anche in questa situazione, ma a causa degli effetti di size finito è possibile che il sistema esplori entrambe le configurazioni.

In questa sezione si mostra tale comportamento nel caso del reticolo con lunghezza $L=20$, prendendo in considerazione due valori di β : 0.5 e 0.7. A tale scopo si misurano i valori della magnetizzazione con la stessa metodologia descritta in precedenza, e si riportano sotto forma di istogramma normalizzato. Si riporta inoltre la storia Montecarlo della magnetizzazione, in cui risultano evidenti le transizioni tra le due fasi ordinate. Si nota inoltre come nel caso in figura 6 le due curve non abbiano la stessa area: ciò è dovuto alla forte dipendenza dalla particolare storia per tempi di misura non infiniti; per tempi infiniti, ci si aspetta che la media della magnetizzazione sia effettivamente nulla.

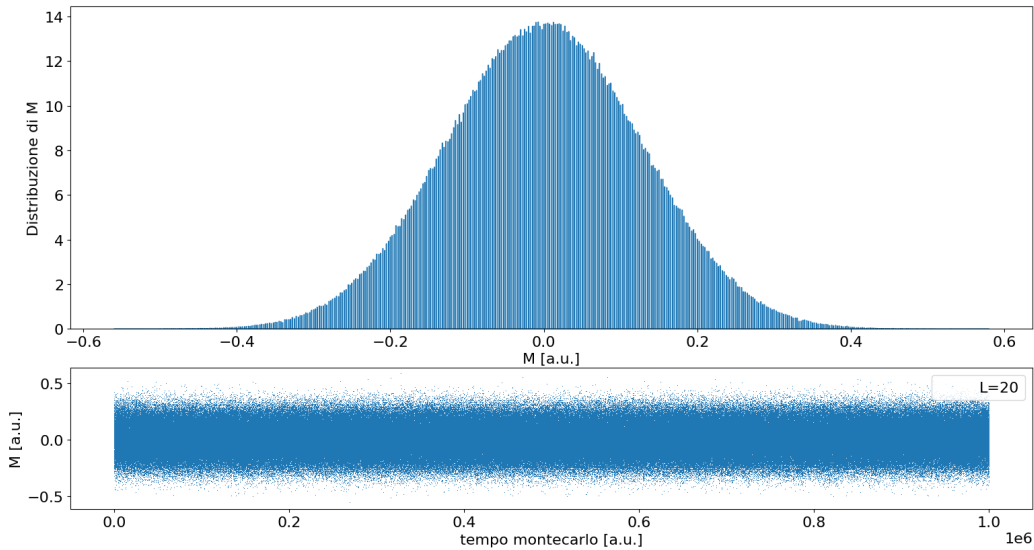


Figura 5: Distribuzione e storia Montecarlo della magnetizzazione per $\beta = 0.5$.

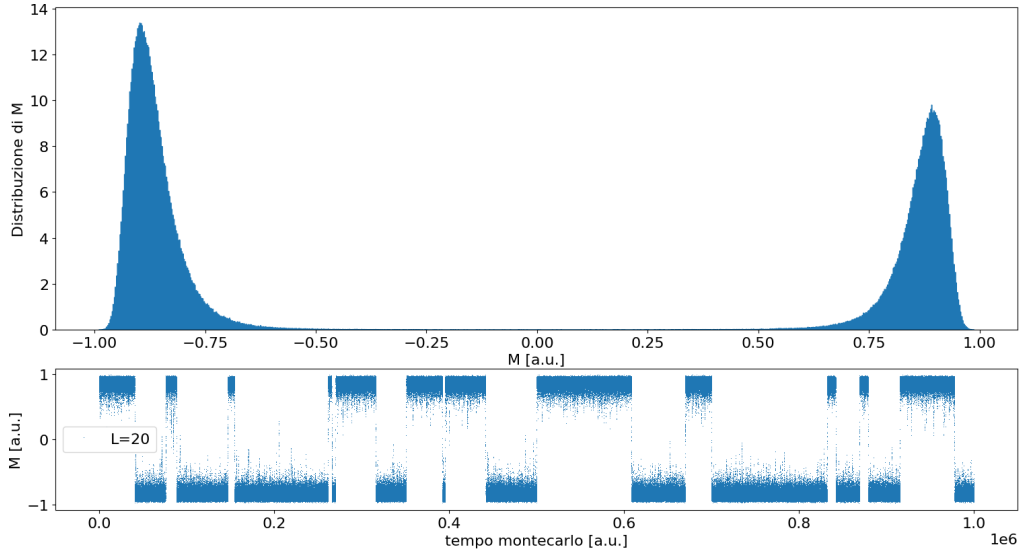


Figura 6: Distribuzione e storia Montecarlo della magnetizzazione per $\beta = 0.7$.

7 Cumulante di Binder

Per distinguere le due fasi è utile osservare l'andamento del cumulante di Binder ($C_B = \langle M^4 \rangle / \langle M^2 \rangle^2$) in funzione della temperatura; in particolare ci si aspetta che per $\beta < \beta_c$ il cumulante sia circa 3 (essendo la magnetizzazione distribuita come una gaussiana a media nulla), mentre per $\beta > \beta_c$ ci si aspetta che il cumulante sia circa 1. Si riportano quindi le misure del cumulante di Binder per diversi valori della lunghezza del reticolo, ottenute con la stessa metodologia descritta in precedenza; si nota come tutte le curve si intersechino in un punto comune, che può essere considerato una stima del β_c a cui avviene la transizione di fase. Si esegue dunque una misura di tale valore, prendendo come valore centrale il punto medio tra le intersezioni delle curve e come incertezza associata la distanza di tale valore dalle intersezioni più estremali. Si ottiene quindi $\beta_c = 0.659 \pm 0.006$, valore compatibile con quello previsto dalla teoria ($\beta_{c,att} \simeq 0.6585$).

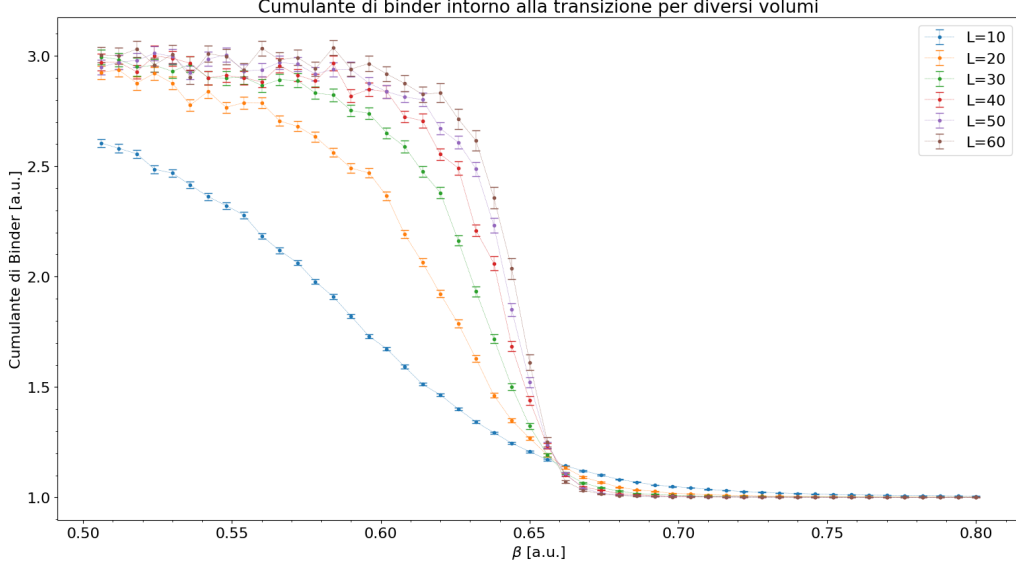


Figura 7: Cumulante di Binder al variare di β e della dimensione del reticolo L .

8 Finite size scaling

Le grandezze termodinamiche, nel caso di un reticolo finito, possono essere espresse come funzioni sia della lunghezza di correlazione, sia della lunghezza del reticolo. Inoltre, è possibile riscalarle tali funzioni con il valore del loro massimo nel punto critico, espresso come funzione di L . Per esempio, nel caso della suscettività, si può scrivere:

$$\chi(\beta, L) = \chi(\xi, L) = L^{\gamma/\nu} \hat{\phi}(L/\xi)$$

dove appunto $\hat{\phi}$ è la funzione riscalata. Utilizzando il fatto che la lunghezza di correlazione diverge in prossimità del punto critico, si può assumere che il sistema perda memoria della struttura microscopica; di conseguenza, l'unico parametro rilevante è proprio il rapporto L/ξ . Usando la relazione $\xi \propto t^{-\nu}$, si trova la seguente relazione di scaling:

$$\chi(\beta, L) = L^{\gamma/\nu} \hat{\phi}(L/\xi) = L^{\gamma/\nu} \phi((\beta - \beta_c)L^{1/\nu})$$

dove si è sostituita la dipendenza da t con quella da $\beta - \beta_c$. Lo stesso ragionamento può essere ripetuto in maniera analoga per il calore specifico e per la magnetizzazione. La conseguenza di questo tipo di descrizione è che le funzioni riscalate presentano un comportamento indipendente dalla lunghezza del reticolo in prossimità della transizione.

9 Grafici delle funzioni riscalate

Si può osservare quanto descritto dall'approccio del finite size scaling graficando le stesse misure della suscettività e della magnetizzazione, ma riscalandole sia l'asse delle ascisse $\beta \rightarrow (\beta - \beta_c)L^{1/\nu}$ sia quello delle ordinate (in modo dipendente dagli esponenti critici). In particolare per la magnetizzazione si ha $|M| \rightarrow |M|L^{\beta/\nu}$ (con β indice critico), per la suscettività si ha $\chi \rightarrow \chi L^{-\gamma/\nu}$. Per i

grafici riportati sono stati utilizzati gli indici critici previsti per il modello di Ising bidimensionale (riportati sopra). Si noti in particolare come nel caso della magnetizzazione il grafico assume l'andamento indipendente dalla lunghezza del reticolo solo per $\beta - \beta_c < 0$ in quanto $\langle M \rangle \sim |t|^\beta$ solo per $T < T_c$.

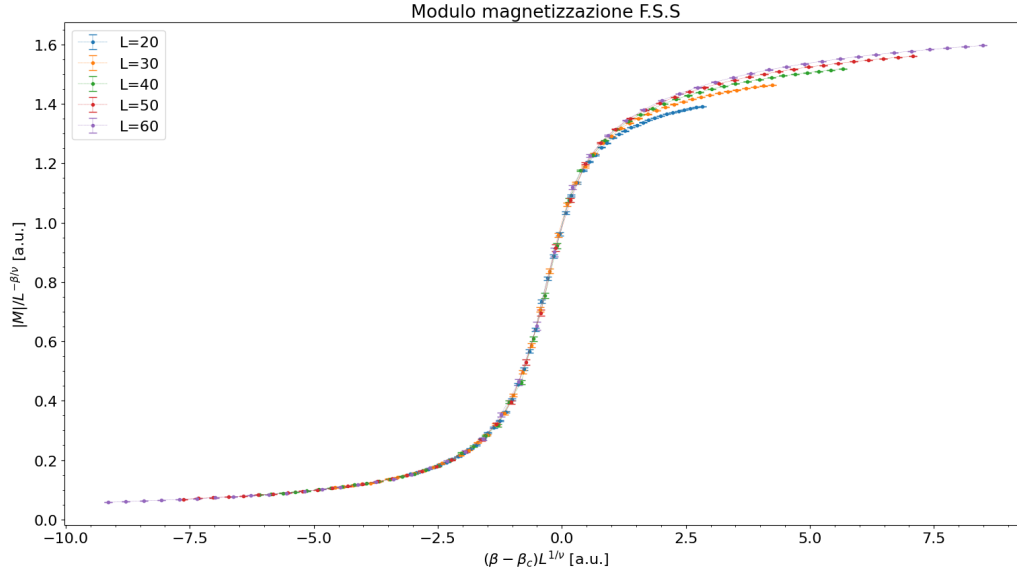


Figura 8: Andamento riscalo del modulo della magnetizzazione.

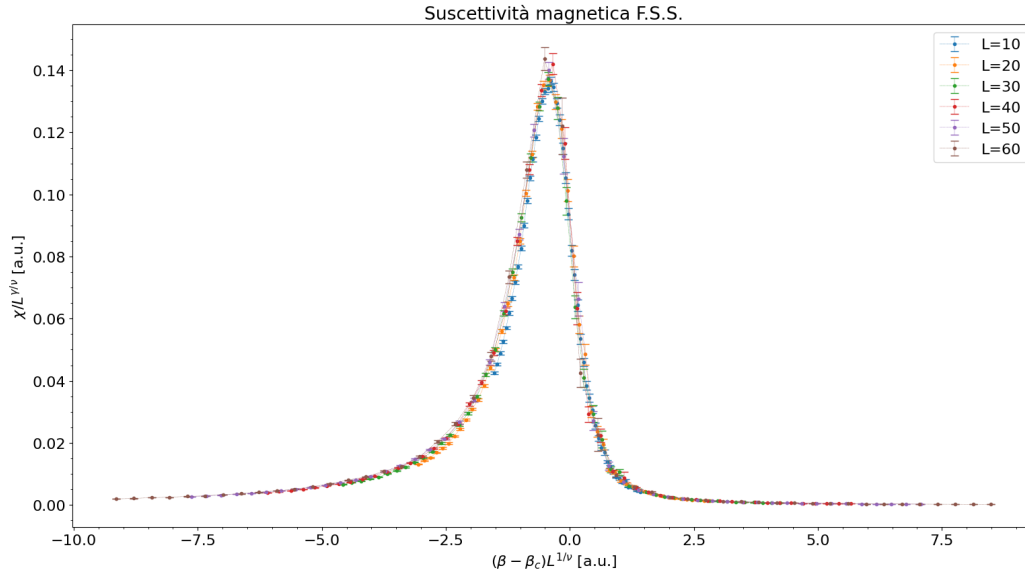


Figura 9: Andamento riscalo della suscettività.

Per quanto riguarda il calore specifico, essendo l'esponente critico $\alpha = 0$, un corretto andamento potrebbe essere ottenuto con ulteriori correzioni nella teoria del modello di Ising per size finito;

tale problema è stato risolto nel caso del grafico riportato facendo prima coincidere i massimi delle singole curve con il massimo di valore maggiore, ovvero quello della curva $L=60$, e solo dopo sono state riscalate le variabili in gioco (in particolare solo l'ascissa viene riscalata in questo caso).

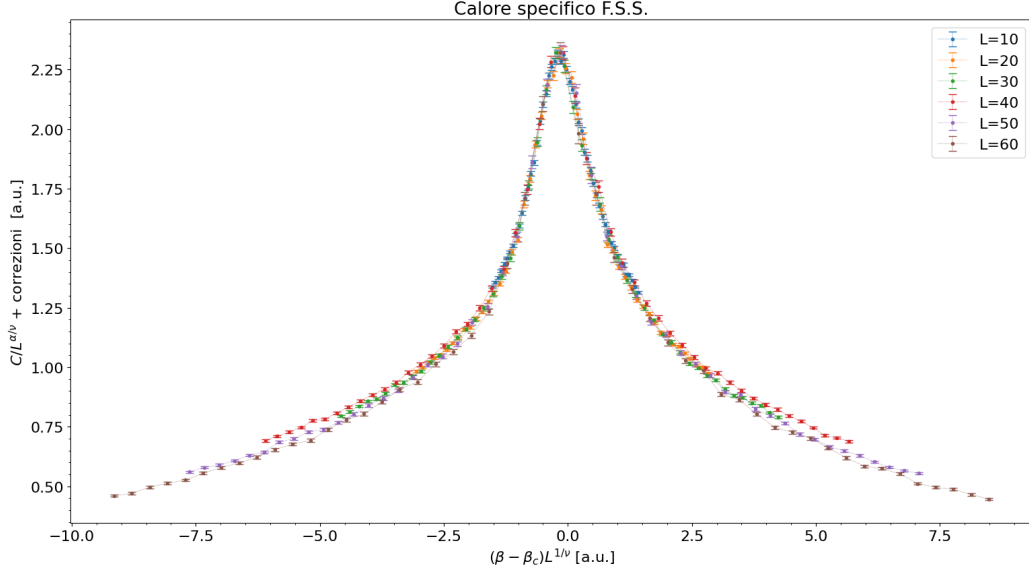


Figura 10: Andamento riscalato del calore specifico.

10 Fit per determinare indici critici

Si vuole adesso verificare l'ipotesi di scaling applicata alla suscettività, ed in particolare della dipendenza del massimo di questa dalla lunghezza del reticolo. Pertanto si esegue un fit dei minimi quadrati graficando χ_{max} al variare di L (per questa sezione sono state eseguite simulazioni anche per $L=15, 25, 35$ e 45 , oltre a quelle riportate in precedenza). La funzione di fit utilizzata è:

$$\chi_m = k L^{\gamma/\nu}$$

considerando come parametri di fit k e il rapporto γ/ν .

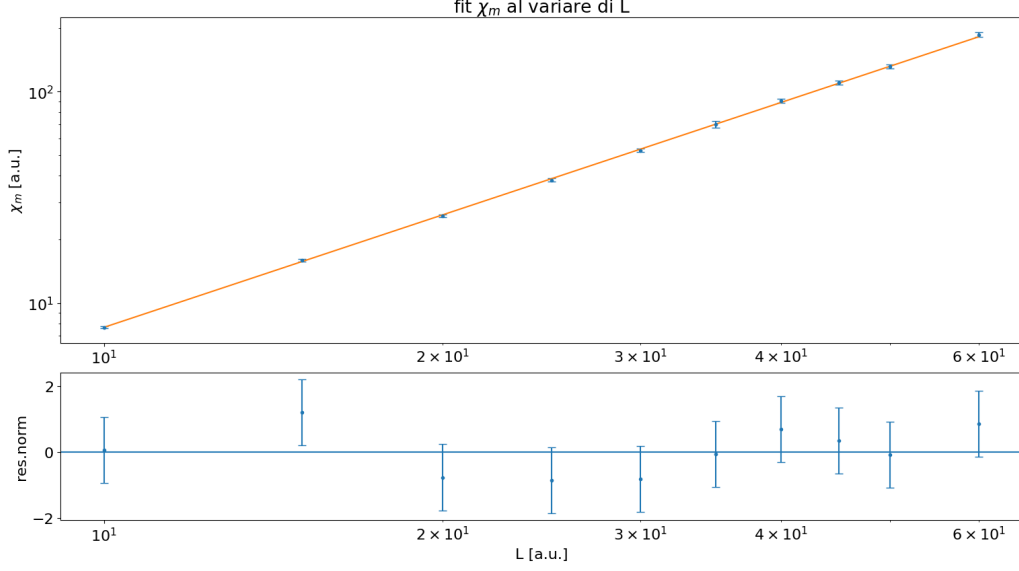


Figura 11: Grafico in scala bilogaritmica del massimo della suscettività al variare di L .

I parametri di best-fit ottenuti sono:

$$k = 0.131 \pm 0.003$$

$$\gamma/\nu = 1.76 \pm 0.01$$

$$\chi^2 = 5 \quad (8 \text{ DOF})$$

Il valore del rapporto γ/ν è compatibile con quello previsto dalla teoria per il modello di Ising bidimensionale, pari a $(\gamma/\nu)_{att} = 1.75$.

Si può anche descrivere lo spostamento del valore per cui si ha il massimo della suscettività, ovvero di β_{pc} al variare di L . Infatti il massimo è sempre sul punto dove la funzione riscalata per la suscettività ha un massimo (\bar{x}). Pertanto si ha:

$$(\beta_{pc}(L) - \beta_c)L^{1/\nu} = \bar{x}$$

Si esegue quindi un fit dei minimi quadrati graficando β_{pc} al variare di L . La funzione di fit utilizzata è:

$$\beta_{pc} = \beta_c + \bar{x} L^{-1/\nu}$$

considerando come parametri di fit β_c , \bar{x} e ν . Come valore di β_{pc} si è considerato il valore di β al corrispondente al massimo della suscettività (non riscalata) e come incertezza è stata considerata la distanza tra due valori di β successivi studiati nelle simulazioni.

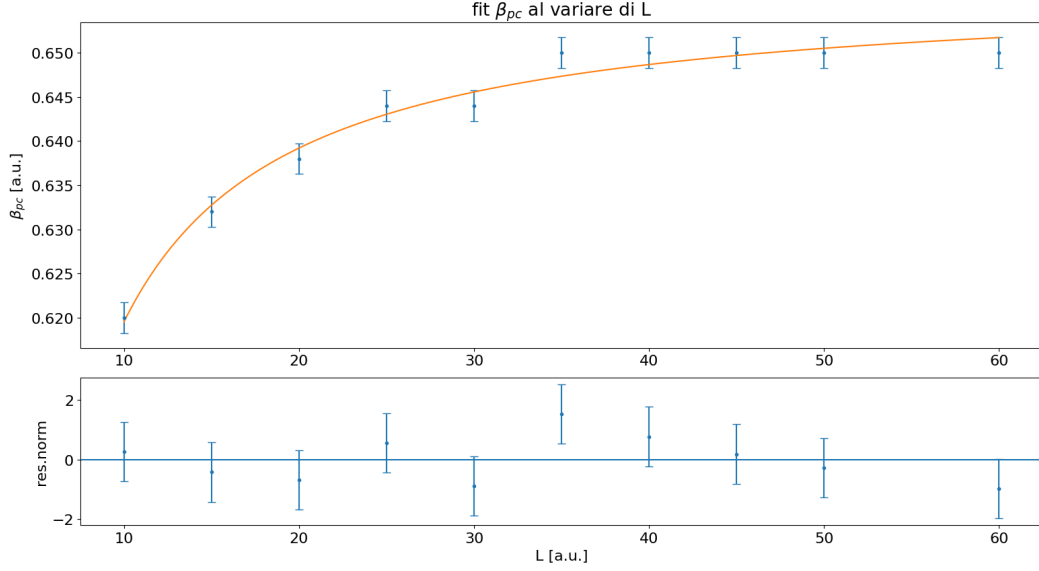


Figura 12: β_{pc} al variare di L.

I parametri di best-fit ottenuti sono:

$$\beta_c = 0.657 \pm 0.004$$

$$\nu = 0.9 \pm 0.2$$

$$\bar{x} = -0.4 \pm 0.2$$

$$\chi^2 = 6 \quad (7 \text{ DOF})$$

I valori di β_c e ν risultano compatibili con i valori attesi per l'Ising bidimensionale su reticolo esagonale. Si nota inoltre come per $L \geq 35$ β_{pc} si assesti su un valore che non corrisponde a β_c , suggerendo di esplorare reticoli di dimensione ancor maggiore per osservare ulteriori correzioni.

11 Universalità

Tutto ciò che è stato descritto nelle sezioni precedenti è una verifica delle classi di universalità, ovvero della dipendenza degli indici critici dalla sola simmetria in gioco e dalla dimensionalità. Ciò è dovuto alla perdita di memoria della struttura microscopica nel regime in cui la lunghezza di correlazione è molto grande, come avviene in prossimità della transizione di fase. Infatti il tipo di analisi effettuata nella sezione del finite size scaling ha verificato il corretto funzionamento degli indici critici (considerando i valori noti per il modello di Ising 2D) anche per il modello su reticolo esagonale, che rappresenta una variante rispetto a quello quadrato. Un'ulteriore verifica è data dai fit per la determinazione degli indici critici γ e ν , che risultano compatibili con quelli previsti dalla teoria.

Riferimenti bibliografici

- [1] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press, Oxford, 1999.
- [2] Jesús Salas. Exact finite-size-scaling corrections to the critical two-dimensional ising model on a torus: Ii. triangular and hexagonal lattices. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35(8):1833, feb 2002.