



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

UNIVERSIDAD DE GRANADA

GRADO EN FÍSICA

FÍSICA COMPUTACIONAL

Modelo de Ising

Autor:

RAFAEL GUERRERO ALONSO

Año 2020/2021

Índice

1. Fundamento teórico	2
1.1. Modelo de Ising	2
1.2. Magnetización de la red	4
2. Estudio a realizar	6
3. Resultados y discusión	8
3.1. Magnetización y temperatura crítica	8
3.2. Energía y calor específico	9
3.3. Exponente crítico β de la magnetización	10
3.4. Función de correlación	11
4. Conclusión	14

Resumen

En este informe se estudiará como evoluciona un sistema de espines de diferente tamaño. Para ello se estudiará la magnetización promedio, la energía media, el calor específico y la función de correlación. Además se compararán los diferentes valores obtenidos mediante la simulación con los exactos calculados por Onsager.

1. Fundamento teórico

El modelo de Ising es un modelo físico con un enorme interés dado su papel en el desarrollo histórico de la comprensión del ferromagnetismo y de las transiciones de fase, en cuyo proceso representó un papel fundamental.



Figura 1: Wilhelm Lenz (1888-1957), Ernst Ising (1900-1998) y Lars Onsager (1903-1976) desarrolladores de dicha teoría.

Básicamente, el modelo de Ising consiste en una red (en el caso de dos dimensiones) en la que en cada nodo se sitúa una partícula que puede tener espín hacia arriba o hacia abajo. Cuando los espines tienen el mismo sentido la energía del sistema es mínima.

1.1. Modelo de Ising

Lenz en 1927 propuso a su estudiante Ising modelar de forma sencilla unos materiales que sufrían un cambio brusco en sus propiedades magnéticas con la temperatura. A temperaturas altas eran paramagnéticos (magnetización espontánea cero) y a temperaturas suficientemente bajas eran ferromagnéticos (magnetización espontánea no nula).

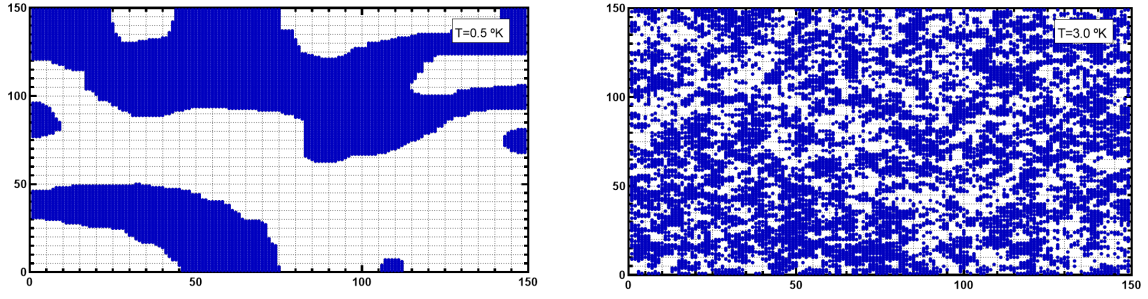


Figura 2: Configuración de espines para una red $N = 150$ donde se puede observar la orientación positiva (datos en blancos) y orientación negativa (datos en azul) de los espines. Se observa una clara magnetización a temperaturas bajas y una desmagnetización a altas temperaturas.

En el conjunto canónico, cada configuración posible se produce con una probabilidad proporcional a $\exp \left[-\frac{E(C)}{k_b T} \right]$ donde T es la temperatura, k_b es la constante de Boltzmann y $E(C)$ es la energía de la configuración. Los pesos de Boltzmann $W(C)$ y la función de partición Z se definen como:

$$W(C) = \exp \left[-\frac{E(C)}{k_b T} \right] \quad (1)$$

$$Z = \sum_C W(C) \quad (2)$$

donde la suma es sobre todas las configuraciones posibles del sistema. El promedio térmico de cualquier cantidad $A(C)$ que depende de la configuración es entonces

$$\langle A \rangle := \frac{1}{Z} \sum_C W(C) A(C) \quad (3)$$

El estudio se centrará en concreto en las funciones de correlación, donde $A(C)$ solo depende de los grados de libertad en N puntos $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$. Las configuraciones de los espines pueden tomar los valores $s_j = \{1, -1\}$ y el peso de Boltzmann de una configuración $\{s_j\}$ es:

$$W[s] = \prod_{\langle ij \rangle} \exp \left(\frac{s_{js_i}}{k_b T} \right) \quad (4)$$

donde el producto se realiza entre los más cercanos. Tendremos que el sistema se encuentra en un estado ordenado para bajas temperaturas, fase ferromagnética (magnetización espontánea no nula), y se desordenan para altas temperaturas, fase paramagnética (magnetización espontánea cero). Ambas fases están separadas por una transición de

fase en un valor finito $T = T_C$. Para caracterizar con mayor precisión la transición de fase, se considera el modelo de Ising en una red cuadrada de $N \times N$ spines con condiciones de frontera periódicas. La energía de del sistema dada una configuración de espines S es:

$$E(S) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) [s(i, j+1) + s(i, j-1) + s(i+1, j) + s(i-1, j)] \quad (5)$$

donde suponemos que el sistema tiene condiciones de contorno periódicas. Si se encuentra bajo las condiciones de energía adecuadas, el spin puede cambiar su valor. Esto es una probabilidad de encontrar una configuración S que viene dada por

$$P(S) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(S)} \quad (6)$$

Además tendremos que tener en cuenta que $T = 0$, $P(S) = \frac{1}{2} \prod_{i,j} \delta(s(i, j) - 1) + \frac{1}{2} \prod_{i,j} \delta(s(i, j) + 1)$. Para generar configuraciones típicas con probabilidad de equilibrio $P(S)$ se usará el algoritmo de Metrópolis:

1. Dar una $T \in [0, 5]$. Generar una configuración inicial de espines.
2. Elegir un punto al azar, (n, m) , de la red.
3. Evaluar $p = \min(1, \exp(-\Delta E/T))$
donde $\Delta E = 2s(n, m) [s(n+1, m) + s(n-1, m) + s(n, m+1) + s(n, m-1)]$. Usar las condiciones de contorno periódicas.
4. Generar un número aleatorio uniforme $\xi \in [0, 1]$. Si $\xi < p$ entonces cambiar el signo del espín (n, m) .
5. Repetir desde el paso (1).

1.2. Magnetización de la red

En la fase de baja temperatura, las configuraciones típicas son aquellas en las que hay una mayoría de $s_j = +1$, o una mayoría de $s_j = -1$. El cambio de fase provoca ruptura de simetría espontánea. Definiremos magnetización media o espontánea al siguiente parámetro:

$$m_N = \left\langle \frac{1}{N^2} \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) \right| \right\rangle \quad (7)$$

Podremos distinguir tres casos diferentes en términos de configuraciones típicas:

1. En la fase de baja temperatura $T < T_C$, la mayoría de los spines están en el mismo estado, y aparecen algunas regiones de spines con signo opuesto que a medida que el sistema avanza tenderán al orden.

2. Si $T = T_C$ todos los tamaños de dominio coexisten
3. En la fase $T > T_C$ de alta temperatura, el sistema está formado por una colección al azar de ± 1 .

Definiremos la función de correlación que existe en la red en el entorno de T_C en función del vecino i -ésimo de cada spin de la siguiente forma:

$$f(i) = \frac{1}{N^2} \sum_{(n,m)} \langle s(n,m)s(n+i,m) \rangle \quad (8)$$

Esta correlación nos dará a entender como de homogénea es la distribución de espines con la que estamos trabajando. Esta depende de la coincidencia de los signos de los spines que se encuentren a una determinada distancia. Si tenemos una distribución determinada la función nos indicará que es una configuración ordenada si el valor se acerca a la unidad, ya que todos los spines tienen todos el mismo signo. Por el contrario si esta función tiene como resultado valor nulo, se trata de una configuración desordenada en la que se encuentran distribuidos de manera aleatoria [1].

2. Estudio a realizar

Se estudiará a lo largo de este informe diferentes magnitudes características en redes de spines de diferente tamaño ($N = 16, 32, 64, 128$) en función de la temperatura ($T \in [1, 5, 3, 5]$). Describiré el comportamiento de las diferentes magnitudes para un rango de temperaturas y tamaños, comparando dichos resultados con los exactos de Onsager y describiendo el efecto del tamaño en cada una de las variables. Además estimaremos el valor del punto crítico, calculando para cada valor de N una estimación del máximo del calor específico, $T_C(N)$, y estudiaré su comportamiento con N extrapolando para $N \rightarrow \infty$. Calcularé numéricamente el exponente crítico β de la magnetización, comparándolo con su valor exacto. Y, en ultimo lugar, estudiaré la función $f(i)$ con la temperatura y el tamaño del sistema, extrayendo la longitud de correlación y su exponente crítico característico. Los pasos que realizará nuestro programa se muestran en la Figura 3 donde se muestra su diagrama de flujo.

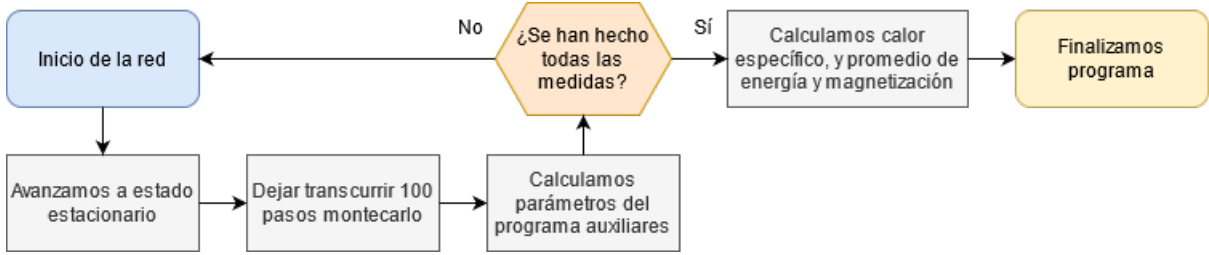


Figura 3: Diagrama de flujo del programa realizado

Partiremos de una configuración ordenada que dejaremos transcurrir 10^6 pasos Montecarlo (pMC) para que el sistema se encuentre en la configuración correspondiente a la temperatura antes de tomar datos. Para determinar las configuraciones, se usa el algoritmo metrópolis y el generador de números aleatorios de la biblioteca GNU Scientific Library. Definiremos el operador $\langle \cdot \rangle$ como el promedio sobre distintas un total de 10^4 medidas realizadas cada 100 pMC. Para cada red de tamaño anteriormente expuesto (N) estudiaremos la magnetización promedio, la energía media, el calor específico y la función de correlación. Dada una red determinada definiremos la energía promedio como:

$$e_N = \frac{\langle E(S) \rangle}{2N} \quad (9)$$

y el calor específico de la red como:

$$c_N = \frac{1}{N^2 T} [\langle E(S)^2 \rangle - \langle E(S) \rangle^2] \quad (10)$$

Tendremos que tener en cuenta las diferentes limitaciones del modelo de Ising, en concreto el tamaño finito de la red. Este se manifiesta como un problema de reconocimiento del punto específico en el que se produce la transición de fase. Este efecto se minimiza mediante el uso de condiciones de contorno periódicas, pero solo se resolvería si se

considerase una red de tamaño infinito como con los valores teóricos asociados para la transición de fase. Será necesario por tanto utilizar una construcción que nos de la posibilidad de explorar el valor teórico respectivo dado el recurso limitado de una red de tamaño finito, es decir, definir un exponente crítico para comprender mejor la naturaleza de la discontinuidad cerca de la temperatura crítica. Tendremos que el exponente crítico λ vendrá dado por:

$$\begin{cases} \lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln|F(t)|}{\ln|t|} \\ F(t) \sim |t|^\lambda \end{cases} \quad (11)$$

donde $t = (T - T_C)$. Este exponente nos ofrece una característica más universal para los diferentes datos recopilados. Tendremos una relación $L \sim |T_C(L = \infty) - T_C(L)|^{-v}$ quedando los exponentes críticos de las diferentes magnitudes como:

$$\begin{cases} M(T) \sim (T_C - T)^\beta & \rightarrow L^{-\beta/v} \\ C \sim (T_C - T)^{-\alpha} & \rightarrow L^{\alpha/v} \end{cases} \quad (12)$$

sabiendo que $v = 1$ para una red de dimensión 2, simplificaremos la expresión obteniendo como resultado final:

$$\begin{cases} M(T) \sim (T_C - T)^\beta & \rightarrow L^{-\beta} \\ C \sim (T_C - T)^{-\alpha} & \rightarrow L^\alpha \end{cases} \quad (13)$$

3. Resultados y discusión

3.1. Magnetización y temperatura crítica

Los resultados obtenidos en nuestra simulación para la magnetización se muestra en la Figura 4 donde se representa la magnetización, para diferentes red, en función de la temperatura.

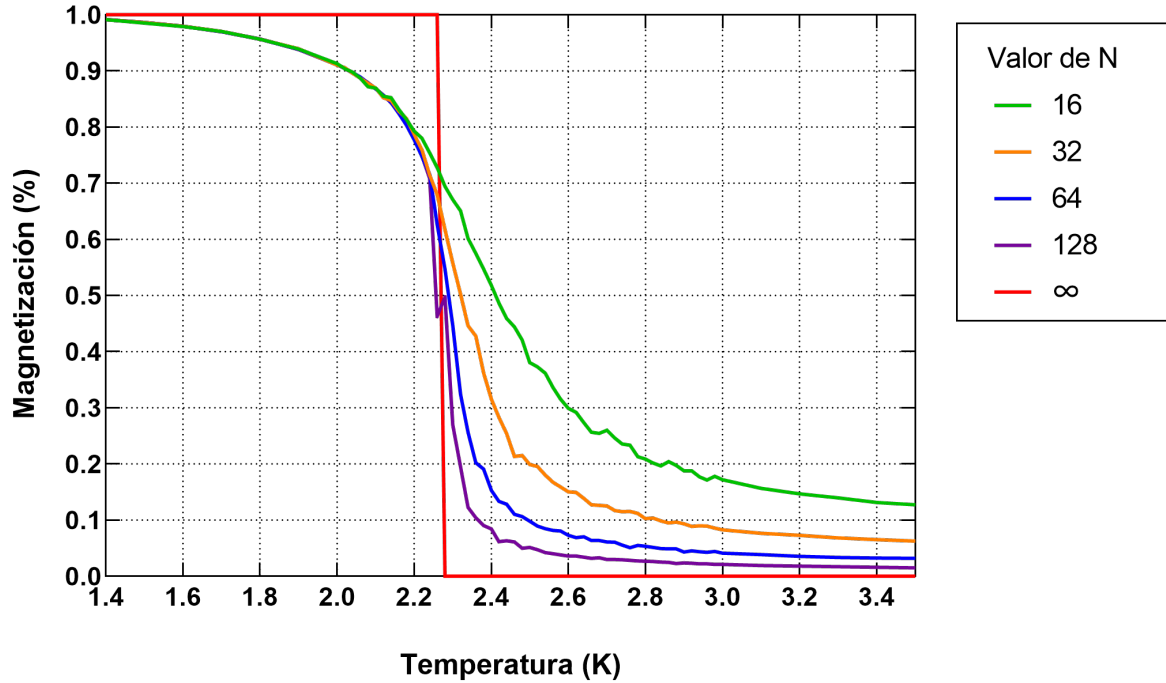


Figura 4: Magnetización de las diferentes redes a estudiar ($N = 16, 32, 64, 128$) en función de la temperatura. Los errores resultan despreciables y no afectan al estudio de la red.

Se puede observar que a partir de una determinada temperatura la magnetización de la red pasa drásticamente de valer $m = 1$ H, magnetización que adquiere el sistema a temperaturas bajas, a prácticamente $m = 0$ H, magnetización a temperaturas altas. Esta se denomina temperatura crítica. Definiremos la temperatura crítica como aquella en la que la muestra presenta una magnetización de $m = 0,5$ H. Como podemos observar, en la figura antes expuesta, podemos comprobar que la pendiente de magnetización en torno a la temperatura crítica aumenta con forme aumenta el número de spines que estudiamos, es decir, con forme aumentamos el N . Este comportamiento es tal que para tamaños de espines muy grandes deberíamos observar una función escalón, es decir, la discontinuidad de la función de magnetización frente a la temperatura. Al

realizar diferentes estudios con tamaños mayores de spines calculamos numéricamente que la discontinuidad se encuentra esencialmente a una temperatura de $T = 2,27K$ (Cuadro 1). Si comprobamos los resultados realizados por Onsager [2] se obtiene que $T = 2,26918K$ con un error relativo asociado de $\epsilon_{T_C} = 0,03614\%$.

Cuadro 1: Valores de la temperatura crítica (T_C) obtenidos para cada tamaño de configuración de espines estudiados. Dicho valor se ha obtenido mediante ajuste de mínimos cuadrados.

	$N = 16$	$N = 32$	$N = 64$	$N = 128$
T_C	$2,27 \pm 0,04$	$2,27 \pm 0,03$	$2,27 \pm 0,03$	$2,269 \pm 0,022$

3.2. Energía y calor específico

Procederemos a representar la energía en función de la temperatura (Figura 5).

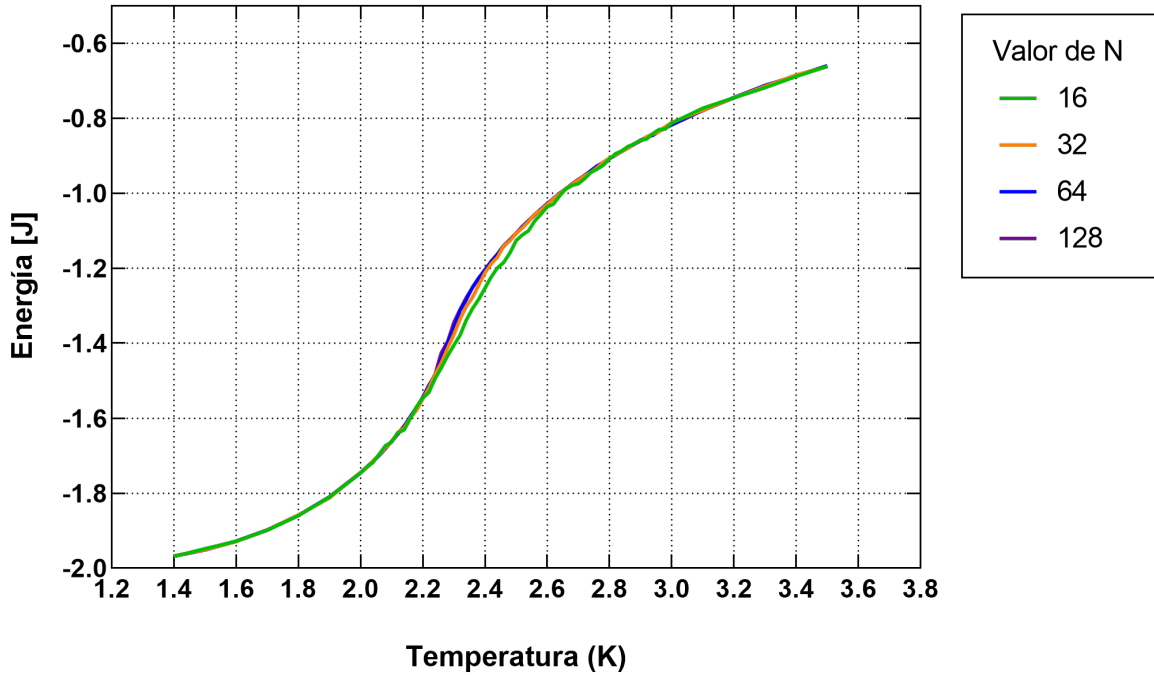


Figura 5: Energía de las diferentes redes a estudiar ($N = 16, 32, 64, 128$) en función de la temperatura. Los errores resultan despreciables y no afectan al estudio de la red.

Podemos observar como la energía de las diferentes redes no depende del tamaño de la red, está dependerá de la temperatura. Las pequeñas fluctuaciones que se muestran en la energía para la red de $N = 16$ son causadas por el error numérico de la simulación.

Dicha energía se obtiene dentro del rango $[2, 0.6]$. Como cabía esperar cuando la temperatura es baja, el sistema se halla ordenado y la energía del sistema es mínima. Sin embargo, conforme vayamos aumentando la temperatura, el sistema comenzará a desordenarse debido a las fluctuaciones térmicas y la energía aumentará. Una vez pasado la temperatura crítica del sistema el desorden será tal que la energía así como la entropía se hacen máximas.

Además realizaremos un estudio del calor específico en función de la temperatura, este se podrá observar en la Figura 6. Se puede comprobar que el máximo se desplaza hacia la izquierda, aproximándose a la temperatura crítica con el tamaño de la red al mismo tiempo que se estrecha. Este pico se corresponde con el cambio de fase de la red. Estos resultados encajan con los resultados de Onsager ya que se tiene que el calor específico tienden a presentar una singularidad logarítmica al estudiar mayores tamaños.

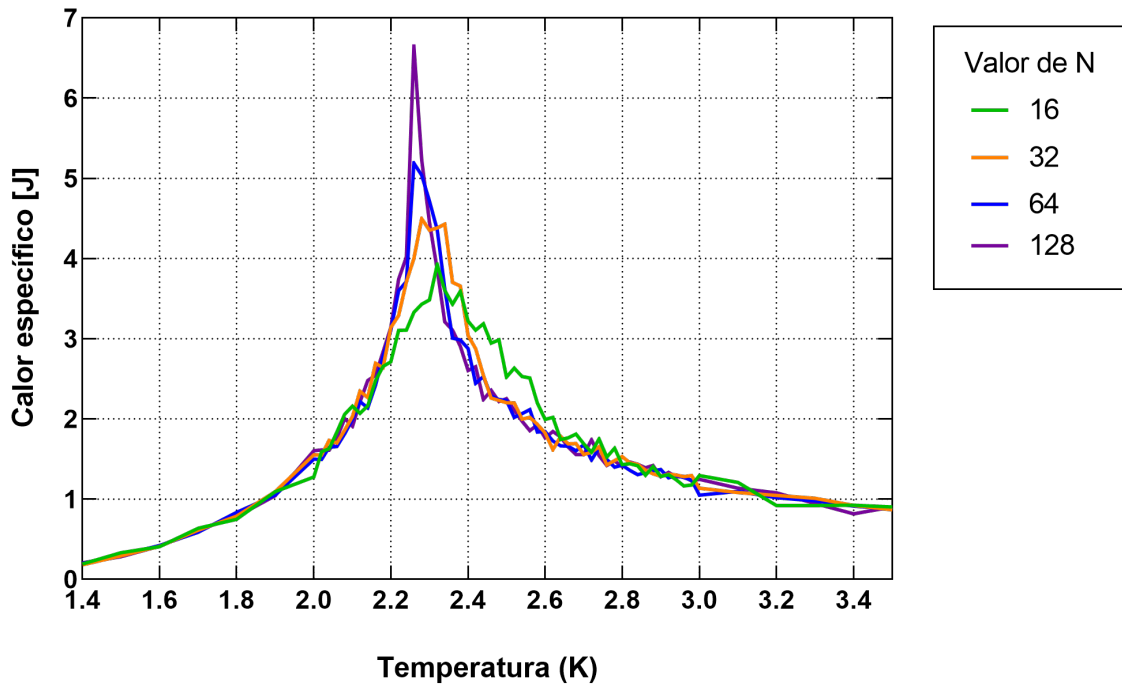


Figura 6: Calor específico de las diferentes redes a estudiar ($N = 16, 32, 64, 128$) en función de la temperatura. Los errores resultan despreciables y no afectan al estudio de la red.

3.3. Exponente crítico β de la magnetización

Procederemos a calcular el exponente crítico de magnetización, para ello se toman los valores de las magnitudes estudiadas en el punto crítico real y trazando un gráfico en escala logarítmica que debe producir una línea recta pendiente igual al exponente crítico.

En la Figura 7 se puede observar el ajuste obteniendo un valor de magnetización $\beta = 0,131 \pm 0,011$. Para obtener un valor lo más próximo posible al valor de la magnetización en el punto crítico se realizó una interpolación de los datos anteriormente calculados mediante la simulación.

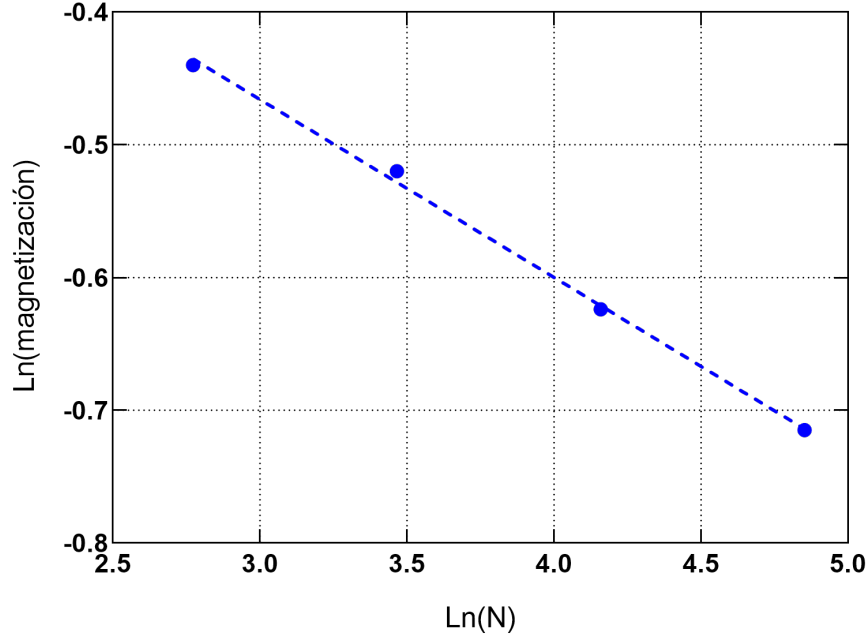


Figura 7: Representación del $\ln(\text{magnetización})$ en función del $\ln(N)$.

Sabiendo que el resultado exacto de Onsager es $\beta_{teo} = 0,125$ obtendremos un error relativo de $\epsilon_{beta} = 4,8\%$.

3.4. Función de correlación

La función de correlación nos dará cuenta del orden en un sistema. Estas describen cómo se relacionan las variables microscópicas, como la densidad en diferentes posiciones. En nuestro caso, intuitivamente, la función de correlación nos da una idea de cómo afecta un espín a los de su entorno.

En primer lugar estudiaremos la dependencia de la función de correlación con el tamaño y la temperatura del sistema. Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 8.

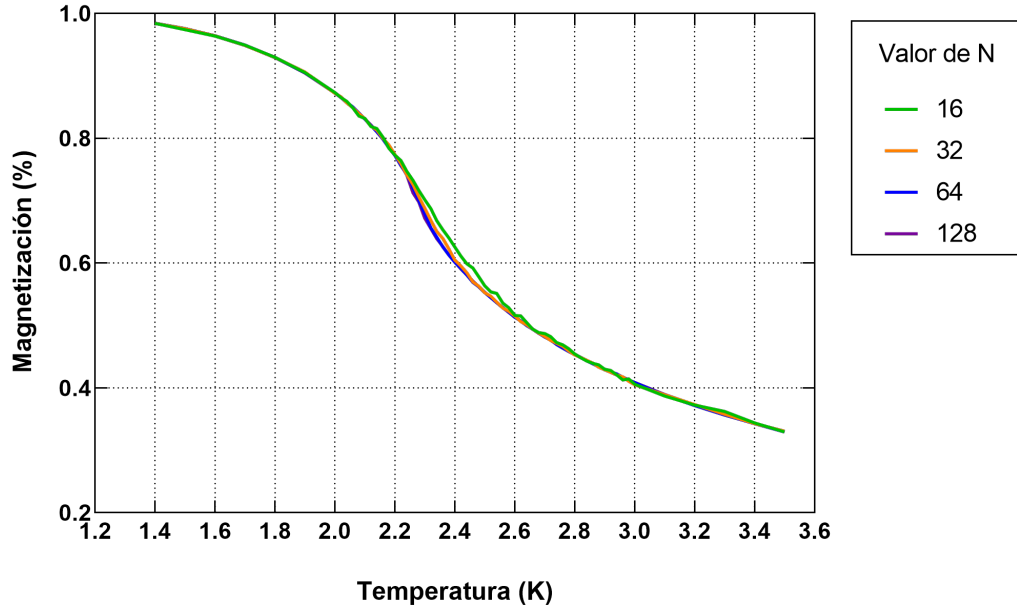


Figura 8: Función de correlación a una distancia $d = 1$ en función de la temperatura para distintos tamaños de sistemas de espines.

Como podemos observar el tamaño del sistema no afecta al comportamiento de la correlación, aunque obtenemos el resultado esperado teóricamente con mayor bondad con forme aumentamos el tamaño de la red de espines. También podemos comentar que el comportamiento que sigue la correlación en función de la temperatura sigue de forma similar al de la magnetización y opuesto a la energía (a bajas temperaturas la correlación de espines es máxima, es decir, los espines se refuerzan entre si para mantener la magnetización del sistema). Con forme nos acercamos al punto crítico, el sistema presenta un cambio de fase, de ordenado a desordenado, y la correlación disminuye. A altas temperaturas la correlación converge a cero, influyendo los espines entre si para mantener un estado no magnetizado de máxima entropía.

Además estudiamos la correlación para diferentes distancias d , los datos obtenidos se muestran en la Figura 9. La correlación decae gradualmente a medida que aumenta la distancia de influencia d . Vemos un comportamiento análogo al anteriormente expuesto tendiendo a cero la correlación por encima de la T_C , siendo más abrupta dicha tendencia para sistemas de espines mayores.

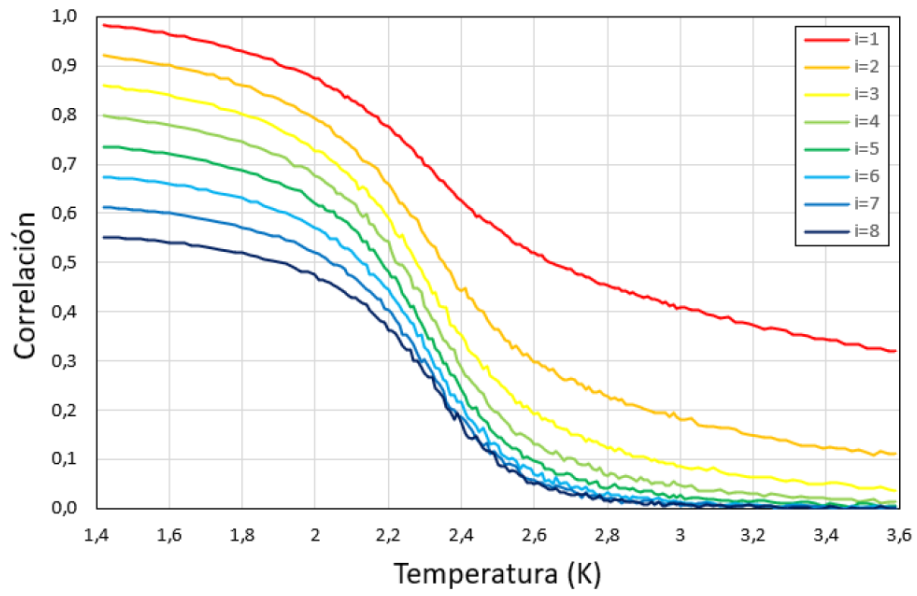


Figura 9: Función de correlación para un tamaño $N = 16$ en función de la temperatura para distintas distancias d .

4. Conclusión

Se ha conseguido simular el cambio de fase de redes ferromagnéticas de diferentes tamaños mediante el algoritmo de Metrópolis.

Hemos observado que para temperaturas inferiores a la temperatura crítica (T_C) la red presenta una magnetización, la cual descende hasta alcanzar un valor nulo al aumentar la temperatura. Con forme se va haciendo mayor el tamaño de la red de espines dicha transición en la magnetización se va haciendo mas abrupta, hasta llegar a ser una función escalón cuando este tamaño tiende a infinito. Este escalón estará centrado en la temperatura crítica. Habiendo conseguido un valor experimental por medio de la simulación muy próximo al teórico con un error relativo de $\epsilon_{T_C} = 0,03614\%$.

Además al estudiar el exponente crítico de la magnetización (β) obtenemos un valor para dicho parámetro, mediante ajuste de mínimos cuadrados, muy cercano al teórico predicho por Onsager, presentando un error relativo de $\epsilon_{\beta} = 4,8\%$.

En cuanto a la energía del sistema obtenida hemos podido comprobar que esta permanece contante para diferentes tamaños de redes de espines y que se hace mínima cuando la temperatura es baja y crece con forme vamos aumentando la temperatura del sistema. Por otro lado al estudiar el calor específico observamos un pico Al estudiar el calor específico que se desplaza hacia la izquierda aproximándose a la temperatura crítica, que aumenta al aumentar el tamaño de la red. Si se extiende el estudio a redes infinitas, se obtiene una discontinuidad esencial característica de los cambio de fase.

Por último se estudió la función de correlación encontrando que la influencia que ejercen los espines entre sí disminuye con la distancia y con la temperatura de una forma cualitativamente similar a como lo hace la magnetización. Para pequeños tamaños, se sigue teniendo una pequeña correlación debido a la condiciones de contorno.

Referencias

- [1] Jacobsen, J. L.. "The two-dimensional Ising model 1/2"
Université Pierre et Marie Curie, Paris. última edición 17- Mar-2016.
- [2] Kotze, Jacques. introduction to Monte Carlo methods
for an Ising Model of Ferromagnet.