

# MECÁNICA ESTADÍSTICA

## TAREA 3: MODELO DE ISING

Semestre 2023-2

Para entregar el martes 10 de octubre de 2023.

### I. Dualidad

En este problema se explora una dualidad entre los desarrollos de alta temperatura y de baja temperatura que permite entre otras encontrar la temperatura crítica del modelo de Ising en dos dimensiones. Esta dualidad fue estudiada por H. A. Kramers y G. H. Wannier [1, 2].

Consideremos el modelo de Ising bidimensional sobre una red cuadrada. El hamiltoniano es

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (1.1)$$

con interacción  $J > 0$  entre más próximos vecinos únicamente. Los espines son  $s_i = \pm 1$ . La temperatura inversa es  $\beta = (k_B T)^{-1}$ . Definiremos  $L = \beta J$ . La red tiene  $N$  espines en total. Se supondrán condiciones de frontera periódicas.

#### I.1. Desarrollo de baja temperatura

Para una configuración dada de los espines, sea  $r$  el número de pares de espines vecinos que están antiparalelos y  $s - r$  el número de pares de espines paralelos, siendo  $s$  el número total de pares de vecinos en la red.

1. Dar la relación entre  $s$  y  $N$  para la red cuadrada.
2. Mostrar que

$$\sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j = s - 2r. \quad (1.2)$$

3. Deducir que la función de partición  $Z$  está dada por

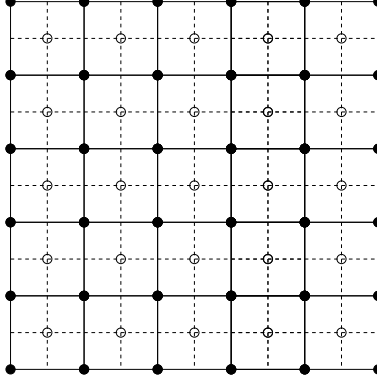
$$Z(T) = 2e^{sL} \left[ 1 + \sum_r \omega_r e^{-2Lr} \right], \quad (1.3)$$

en donde  $\omega_r$  es el número de configuraciones diferentes que tienen  $r$  pares de espines vecinos antiparalelos.

4. Explicar por qué el resultado (1.3) es un desarrollo de baja temperatura de la función de partición.

## I.2. Red dual

Se define la red dual de la red original poniendo sitios de la nueva red (dual) en los centros de los cuadrados que forma la red original.



La figura muestra la red original: los espines están en los puntos negros, y la red dual: puntos en blanco.

Para la red original, el desarrollo de alta temperatura de la función de partición (visto en clase) da:

$$Z(T) = 2^N (\cosh L)^s \left[ 1 + \sum_n \Omega_n u^n \right], \quad (1.4)$$

en donde se definió  $u = \tanh L$  y  $\Omega_n$  es el número de gráficos compuestos de  $n$  barras que contribuyen a la función de partición. Recordemos que estos gráficos son todos los gráficos compuestos de polígonos cerrados en que cada punto tiene un número par de barras que llegan a él.

## I.3. Auto-dualidad y determinación de la temperatura crítica

1. Dibuje una configuración cualquiera de gráficos con  $n = 20$  barras.
2. En esa configuración dibuje *en la red dual* espines hacia arriba dentro de los polígonos y espines abajo afuera de los polígonos.
3. Inspirarse de los dibujos anteriores para demostrar y explicar que existe una dualidad entre el modelo de Ising sobre la red original y un nuevo modelo de Ising sobre la red dual (que definirá). En particular muestre que mientras la función de partición  $Z(T)$  del modelo original está dada por un desarrollo de alta temperatura de la forma (1.4), la función de partición  $Z^*(T)$  del modelo dual está dada por un desarrollo de baja temperatura

$$Z^*(T) = 2e^{sL} \left[ 1 + \sum_r \omega_r^* e^{-2Lr} \right], \quad (1.5)$$

con  $\omega_r^* = \Omega_r$ .

Se define ahora una temperatura  $T^*$  por la igualdad

$$\exp(-2L^*) = \tanh L, \quad (1.6)$$

con  $L^* = J/(k_B T^*)$ .

4. Mostrar que la función de partición del modelo original a la temperatura  $T$  es proporcional a la función de partición del modelo dual a la temperatura  $T^*$ :

$$Z(T) = 2^{N-1} (\cosh L)^s e^{-sL^*} Z^*(T^*). \quad (1.7)$$

5. Demostrar que esta relación se puede escribir también de forma simétrica

$$\frac{Z(T)}{2^{(N-1)/2}(\cosh 2L)^{s/2}} = \frac{Z^*(T^*)}{2^{(N+1)/2}(\cosh 2L^*)^{s/2}}. \quad (1.8)$$

6. Mostrar que en el limite termodinámico  $Z = Z^*$  y

$$\frac{Z(T)}{(\cosh 2L)^{s/2}} = \frac{Z(T^*)}{(\cosh 2L^*)^{s/2}}. \quad (1.9)$$

7. Deducir que si hay una transición de fase en  $T = T_c$  también hay una para  $T_c^*$ .  
 8. Suponiendo que sólo hay una transición de fase en el modelo de Ising bidimensional demostrar que la temperatura crítica  $T_c$  está dada por

$$\sinh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1. \quad (1.10)$$

## II. Simulación Monte Carlo del modelo de Ising con el algoritmo de Metropolis

Considere el modelo de Ising en dos dimensiones en red cuadrada, con hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j. \quad (2.1)$$

El algoritmo de Metropolis [3] se basa en generar configuraciones aleatorias del sistema con peso estadístico  $e^{-\beta H}$  y usar estas para calcular promedios de las cantidades físicas de interés. El algoritmo es el siguiente:

1. Se genera una configuración de espines al azar.
2. Se selecciona un espín de la red al azar.
3. Se calcula el cambio de la energía total del sistema  $\Delta E$  si este espín se voltea.
4. Si  $\Delta E \leq 0$  se acepta el cambio y se repite el proceso a partir de 2.
5. Si  $\Delta E > 0$ , se escoge un número real aleatorio  $p$  entre  $[0, 1]$  con probabilidad uniforme y si  $p < e^{-\beta \Delta E}$  se acepta el cambio del espín, de lo contrario no se acepta y se regresa el espín a su configuración anterior.
6. Se repite el proceso a partir de 2.

### II.1. Elementos de teoría

1. ¿Con qué probabilidad se está aceptando un cambio de un espín?
2. Sea  $C_1$  una configuración de espines, con energía  $H(C_1)$  y  $C_2$  otra configuración de espines en la cuál se volteo un solo espín. Sea  $W(C_1 \rightarrow C_2)$  la probabilidad condicional de pasar de la configuración  $C_1$  a la  $C_2$  usando el algoritmo de Metropolis. Sea  $P_{\text{eq}}(C_1) = e^{-\beta H(C_1)}/Z$  la probabilidad en el ensamble canónico que la configuración  $C_1$  ocurra ( $Z$  es la función de partición canónica). Mostrar que

$$P_{\text{eq}}(C_1)W(C_1 \rightarrow C_2) = P_{\text{eq}}(C_2)W(C_2 \rightarrow C_1) \quad (2.2)$$

Esta condición se conoce como condición de balance detallado y garantiza que después de cierto tiempo las configuraciones obtenidas por el algoritmo de Metropolis tienen efectivamente un peso estadístico  $P_{\text{eq}}$ .

## II.2. Implementación

1. Programe el algoritmo de Metropolis usando el lenguaje de programación que prefiera. Para cada paso de la simulación almacenar el valor de la energía y de la magnetización.
2. Grafique la energía del sistema en función del tiempo de simulación. Observe como ésta evoluciona. Después de cierto tiempo de simulación ésta debería estabilizarse alrededor de un valor constante, con algunas fluctuaciones.
3. Con las configuraciones obtenidas después que el valor de la energía se estabilizó, calcule el valor promedio de la energía y de la magnetización. Para obtener estos promedios es conveniente incluir en su programa el código necesario que haga estos cálculos.
4. Repita este proceso para diferentes valores de la temperatura, tomando valores tanto por encima como por debajo de la temperatura crítica  $T_c$ . Se recuerda del problema I que para el modelo de Ising en la red cuadrada la temperatura crítica es la solución de  $\sinh(2J/(k_B T_c)) = 1$ .
5. Con esos datos haga el gráfico de la magnetización en función de la temperatura. Comente los resultados obtenidos.

Para esta parte de la tarea, entregar un informe en formato de artículo científico con los resultados y análisis de su simulación que incluya las dos gráficas mencionadas en las preguntas 2 y 5, indicando cuales fueron los parámetros usados: numero de espines, temperatura, numero de pasos Monte Carlo usados para dejar estabilizar el sistema y numero de pasos Monte Carlo usados para calcular los promedios, así como su análisis de los resultados obtenidos.

Subir el código fuente de su programa de simulación a un repositorio público en github. El repositorio debe contener, como mínimo, el código fuente *debidamente documentado* (`docstrings` de python o su equivalente en el lenguaje que utilice) y un archivo `README.md` con instrucciones para la compilación y/o requerimientos de software del código para su funcionamiento. Indicar en el informe la URL del repositorio con el código fuente.

## Referencias

- [1] H. A. Kramers and G. H. Wannier. Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I. *Physical Review*, 60:252–262, 1941.
- [2] H. A. Kramers and G. H. Wannier. Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part II. *Physical Review*, 60:263–276, 1941.
- [3] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller. Equations of State Calculations by Fast Computing Machines. *Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953.