

Voluntario Ising 1

Javier González Moreno
Física Computacional
Grado en física Universidad de Granada

18 de abril de 2025

Índice

1. Introducción.	1
1.1. Solución de Onsager.	3
1.2. Teoría de tamaño finito.	3
2. Metodología.	4
2.1. Problema a estudiar y parámetros.	4
3. Resultados y conclusiones.	5
3.1. Resultados en función de temperatura y N.	5
3.1.1. Magnetización en función de temperatura a diferentes N.	5
3.1.2. Calor específico en función de temperatura a diferentes N.	7
3.1.3. Energía media en función de temperatura a diferentes N.	7
3.1.4. Función de correlación en función de temperatura a diferentes N.	8
3.2. Exponentes críticos y longitud de correlación.	11

1. Introducción.

Dentro de la física estadística el modelo de Ising fue uno de los primeros modelos en surgir pero también es de lo más útiles debido a su exactitud en las soluciones analíticas.

Este modelo es aplicable para estudiar las transiciones ferromagnéticas. Se comienza con una red cristalina en la que cada sitio es ocupado por un spin, que puede tomar los valores 1 o -1 y el hamiltoniano total del sistema será:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} s_i \cdot s_j - H \cdot \sum_i s_i \quad (1)$$

Donde J es la energía de interacción, y H es el campo magnético externo aplicado. $\langle i,j \rangle$ nos indica la interacción entre spines que se encuentran próximos.

Si tratáramos de minimizar la energía tendríamos una fase ordenada, pero debemos tener en cuenta el efecto aleatorio de la temperatura que hace que los valores de los spines cambie, y

mientras mayor sea la temperatura más considerable será este efecto, por lo que la fase será más desordenada. Conociendo que la magnetización:

$$M = \sum_i s_i \quad (2)$$

Sabemos que un estado macroscópico viene definido por una serie de variables extensivas fijadas. Nuestro sistema sufrirá una transición de fase cuando un sufra un cambio de un estado inicial a otro.

La forma más familiar de una transición de fase es cuando nuestro sistema experimenta un intercambio de energía. Estas transiciones de energía se conocen como transiciones de primer orden que se caracterizan por sus discontinuidades.

Pero existen unos valores concretos de temperatura y presión en los que la transición se produce sin diferencia entre las fases, estos valores se conocen como valores críticos y son altos.

En estos determinados valores la transición es de segundo orden y se caracteriza por la continuidad de sus parámetros extensivos y sus derivadas además de algún parámetro discontinuo como el calor específico o la compresibilidad isoterma. En nuestro estudio tenemos la temperatura de Curie, que será la temperatura que marcará el valor en el que por encima nuestro sistema no está magnetizado si no hay un campo aplicado. Por lo que marcará la frontera en la que el sistema pasa de estar en fase ferromagnética a paramagnética.

La transición a estudiar de nuestro problema vendrá definida por las discontinuidades en las derivadas de primer orden del calor específico y la susceptibilidad magnética. Su comportamiento vendrá dado por la temperatura crítica y los exponentes críticos:

$$C_v \sim |1 - T/T_c|^\alpha \quad (3)$$

$$X_v \sim |1 - T/T_c|^\gamma \quad (4)$$

Los valores de estos parámetros que definen el calor específico y la susceptibilidad magnética dependen de la dimensión de nuestro sistema y de los grados de libertad. Definimos también el llamado parámetro de control que es el que nos va a indicar si el sistema ha realizado una transición de fase o no (en nuestro sistema obviamente este parámetro será la magnetización).

Si nos centramos en el estudio microscópico la función de correlación será la que nos aporte la información que necesitamos. Esta función $f(i, T)$ vendrá definida por:

$$f(i, T) \sim \begin{cases} \exp(-\frac{i}{\xi(T)}) & \text{si } T > T_c \\ \frac{1}{i^{d-2+\eta}} & \text{si } T = T_c \end{cases} \quad (5)$$

Donde η es un exponente crítico, d es la dimensión del espacio y tenemos que ξ es la longitud de correlación que viene dado por:

$$\xi(T) \sim |1 - T/T_c|^\nu \quad (6)$$

Es interesante que con solo conocer 2 exponentes críticos podemos obtener los demás ya que estos están relacionados entre sí:

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (7)$$

$$2 = \alpha + 2\beta + \gamma \quad (8)$$

$$\nu d = 2 - \alpha \quad (9)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (10)$$

1.1. Solución de Onsanger.

Para estudiar los resultados que obtengamos con nuestra simulación vamos a usar los resultados de la solución de Onsanger para comparar y sacar conclusiones.

Onsanger fue el primero en darle solución analítica al problema bidimensional de Ising, demostrando que las transiciones de fases podían ser descritas por la física estadística. Son importantes los siguientes resultados teóricos:

$$M = \begin{cases} 0 & \text{si } T > T_c \\ N [1 - \sinh^{-4}(2\beta J)]^{1/8} & \text{si } T < T_c \end{cases} \quad (11)$$

$$K_B T_c \approx 2,269J \quad (12)$$

$$C_v = Nk_B \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{K_B T_c} \right)^2 \left[-\ln \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) + \ln \left(\frac{K_B T_c}{2J} \right) - \left(1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] \quad (13)$$

1.2. Teoría de tamaño finito.

Todos estos resultados analíticos de Onsanger que hemos presentados vienen dados en el límite termodinámico, que es cuando el número de partículas tiende a infinito.

En el caso de la simulación computacional es imposible llevar esto a cabo, es por eso que K.Binder desarrolló una técnica de escalación al finito.

Tal y como hemos mostrado antes la longitud de correlación cuando se aproxima a la temperatura crítica diverge:

$$\xi(T) \sim |1 - T/T_c|^\nu \quad (14)$$

Al ser un problema finito no será posible este resultado, sin embargo si que podemos ver que mientras más aumente N más cercano estará. Con esto definimos los exponentes finitos.

Si tenemos un observable A con exponente crítico σ tendremos:

-La altura del pico escalará como $N^{\sigma/\nu}$.

-La posición del pico escala como $N^{-1/\nu}$.

-La anchura del pico escala como $N^{-1/\nu}$.

Obviamente aunque sea el problema finito el valor que tomará N debe ser elevado.

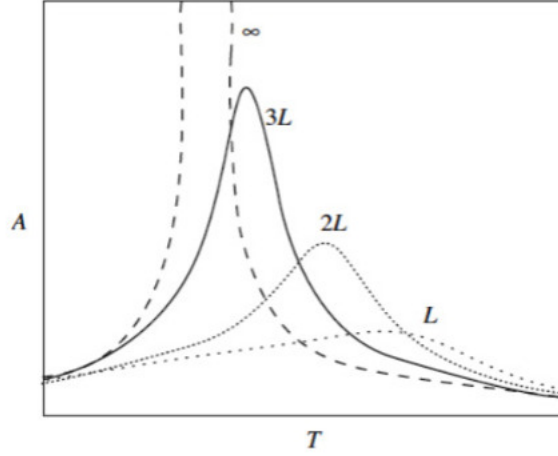


Figura 1: Comportamiento de un observable A frente a temperatura cercana a la crítica para diferentes N.

2. Metodología.

2.1. Problema a estudiar y parámetros.

En nuestro programa vamos a estudiar el problema de Ising en dos dimensiones usando el método Montecarlo. Se tomará un tamaño N inicial (en nuestros caso simularemos para N iguales a 16, 32, 64, 132), y se comenzará con una configuración inicial de spines en los que todos toman el valor 1. Con nuestro algoritmo iremos evolucionando el sistema y cuando completemos 100 pMc realizaremos una medida de los parámetros que se describirán a adelante, y realizaremos un promedio de cada una de estas medidas (en total serán unas 10^4 medidas). Para cada una de las N con la que vamos a simular tomaremos diferentes temperaturas que valdrán 1,5; 1,7; 1,8; 2; 2,2; 2,23; 2,24; 2,25; 2,26; 2,27; 2,28; 2,29; 2,3; 2,6; 2,8; 3; 3,2; 3,4.

Los parámetros a calcular serán la magnetización promedio y su error, la energía media y su error, el calor específico y la función correlación:

La magnetización media y su correspondiente error:

$$m_n = \left\langle \frac{1}{N^2} \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) \right| \right\rangle \quad (15)$$

$$\langle \Delta M \rangle^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \quad (16)$$

La energía media:

$$e_N = \frac{\langle E(S) \rangle}{2N} \quad (17)$$

$$\langle \Delta e \rangle^2 = \langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2 \quad (18)$$

Donde la energía:

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N -0,5s(i,j)[s(i,j+1) + s(i,j-1) + s(i+1,j) + s(i-1,j)] \quad (19)$$

El calor específico:

$$C_v = \frac{\langle E(S)^2 \rangle - \langle E(S) \rangle^2}{N^2 T} \quad (20)$$

Y la función de correlación

$$f(i) = \frac{1}{N^2} \sum_{(n,m)} \langle s(n,m)s(n+1,m) \rangle \quad (21)$$

3. Resultados y conclusiones.

3.1. Resultados en función de temperatura y N.

3.1.1. Magnetización en función de temperatura a diferentes N.

Para que los resultados gráficos sean más visibles representaremos gráficamente los datos sin el error, y este último lo representaremos en una tabla (si representáramos los datos para diferentes N cada uno con sus errores nos dificultaría la observación de la tendencia de la curva cuando se aproxima a la temperatura crítica:

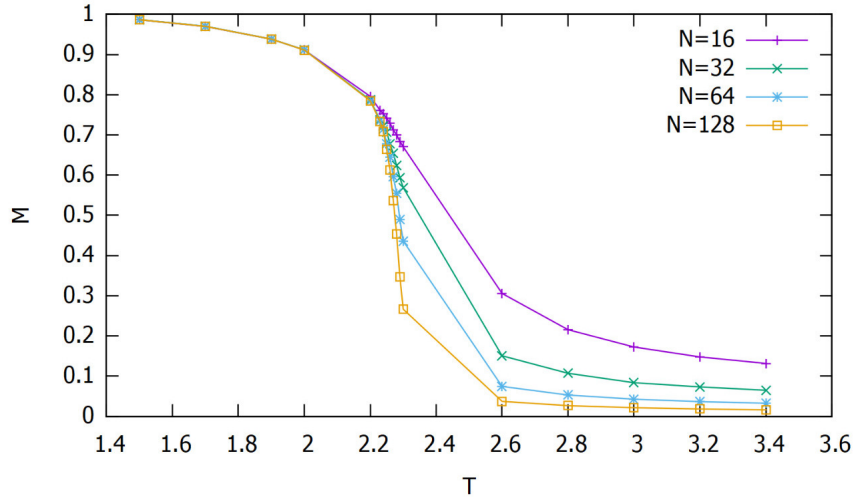


Figura 2: Magnetización en función de la temperatura a diferentes N.

Analizando nuestros resultados experimentales obtenemos las siguientes temperaturas críticas: Para $N=16$ tenemos $T_c = 2,33$, para $N=32$ tenemos $T_c = 2,29$, para $N=64$ tenemos $T_c = 2,29$, para $N=128$ tenemos $T_c = 2,27$.

Ahora tal y como hemos indicado vamos a determinar los errores para cada uno de los valores de la magnetización:

Magnetización	Varianza
0.9864609374999997	0.64722775000018373
0.96990859375000005	1.9512767774995154
0.93833359375000003	6.0356287774998236
0.91141640624999998	12.446745577500224
0.79573671874999996	82.704567877500267
0.76114375000000001	115.80499576000011
0.75276953125000001	121.25870743750011
0.74125859375000003	123.59374069749992
0.72960859374999998	136.77466949750033
0.71197578125000005	148.98375939749940
0.70070078125000002	154.45675347749966
0.68410703125000005	170.58237087749967
0.67032968749999999	176.17816878999997
0.30566718749999999	160.41766870999999
0.21549062499999999	94.499186040000041
0.17243671875000000	64.073332597499999
0.14759296875000000	48.131303597499993
0.13156953125000001	39.342346797499985

Lo primero que observamos es que conforme aumenta la temperatura disminuye la magnetización, y vemos que cuando la dimensión de la red es mayor esta tendencia de que disminuya la magnetización se acelera. Esto último cuadra con lo esperado teóricamente, pues al producirse la transición en el límite termodinámico mientras más alto sea el valor de N más se equiparará con lo esperado.

Si nos fijamos en la varianza de diferentes valores de magnetización vemos que esta es notablemente mayor mientras más próxima la temperatura se encuentre al valor crítico.

Y fijándonos en las temperaturas críticas de cada N y comparándola con el valor teórico $T_c = 2,269$, vemos que el valor de T_c que menos error relativo tiene es para $N=128$, por lo que coincide con lo esperado por la teoría del tamaño finito en la que veíamos que la posición del pico escalaba como $N^{\frac{1}{\nu}}$.

3.1.2. Calor específico en función de temperatura a diferentes N.

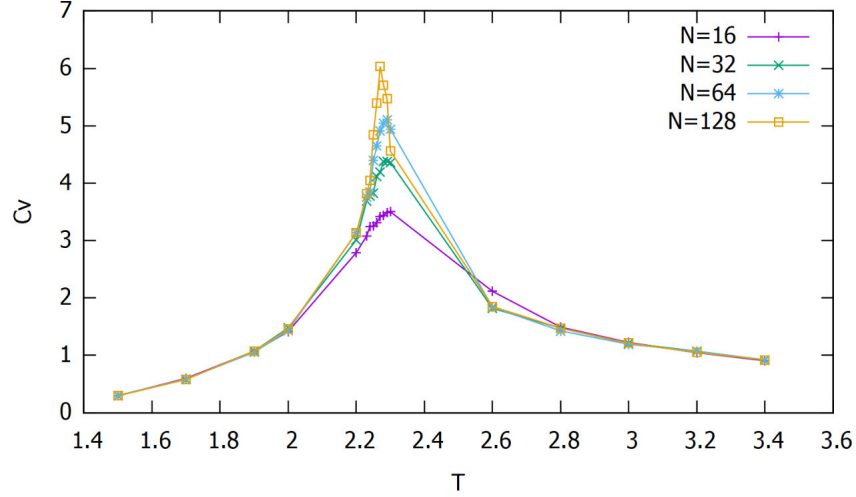


Figura 3: Calor específico en función de la temperatura a diferentes N.

Analizando nuestros resultados experimentales obtenemos las siguientes temperaturas críticas: Para $N=16$ tenemos $C_v = 3,50$, para $N=32$ tenemos $C_v = 4,40$, para $N=64$ tenemos $C_v = 5,21$, para $N=128$ tenemos $C_v = 6,23$.

Lo primero que observamos es que mientras más próximo nos encontramos al valor la temperatura crítica la capacidad calorífica muestra mayor divergencia.

Analizando los calores específicos críticos para los diferentes valores de N vemos que para mayores N los valores son mayores, teniendo para $N=128$ el valor más cercano al teórico, resultado que coincide con la teoría del tamaño finito que enunciaba que la altura del pico escala como $N^{\sigma/\nu}$.

3.1.3. Energía media en función de temperatura a diferentes N.

A continuación al igual que antes vamos a representar los errores para cada valor de energía en tabla para poder distinguir mejor los resultados gráficos:

E	Varianza
0.98646093749999997	0.64722775000018373
0.96990859375000005	1.9512767774995154
0.93833359375000003	6.0356287774998236
0.91141640624999998	12.446745577500224
0.79573671874999996	82.704567877500267
0.76114375000000001	115.80499576000011
0.75276953125000001	121.25870743750011
0.74125859375000003	123.59374069749992
0.72960859374999998	136.77466949750033
0.71197578125000005	148.98375939749940
0.70070078125000002	154.45675347749966
0.68410703125000005	170.58237087749967
0.67032968749999999	176.17816878999997
0.30566718749999999	160.41766870999999
0.21549062499999999	94.499186040000041
0.17243671875000000	64.073332597499999
0.14759296875000000	48.131303597499993
0.13156953125000001	39.342346797499985

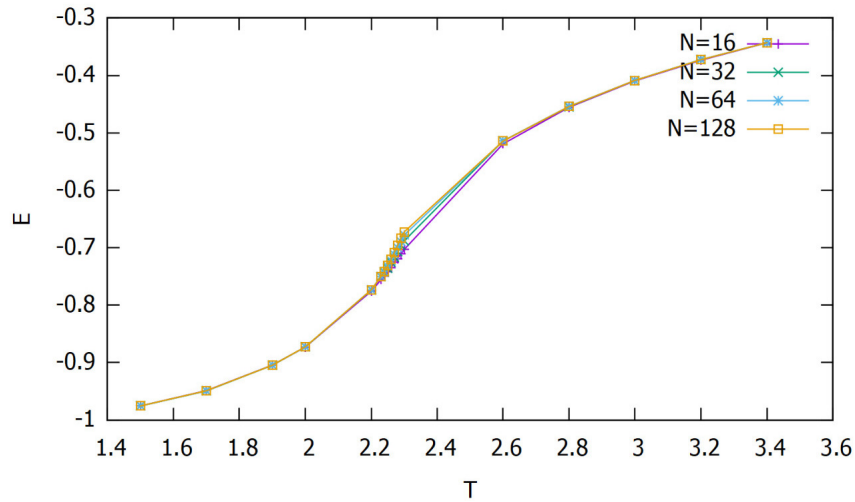


Figura 4: Energía media en función de la temperatura a diferentes N .

Lo primero que observamos es que lógicamente a mayor temperatura la energía aumenta. También es apreciable que en valores cercanos a la temperatura crítica se estabiliza un poco la curva.

Otra tendencia que observamos es que en esos valores cercanos a la temperatura crítica aumenta el error de la energía, esto se debería a las fluctuaciones.

3.1.4. Función de correlación en función de temperatura a diferentes N .

Para estudiar la función de correlación vamos a fijar la temperatura y veremos como varía $f(i)$ según i . Realizaremos gráficas para diferentes N , y en cada una de ellas representaremos las curvas

para diferentes temperaturas($T=1.5; 2.6; 3; 3.4$). Empezamos para $N=16$:

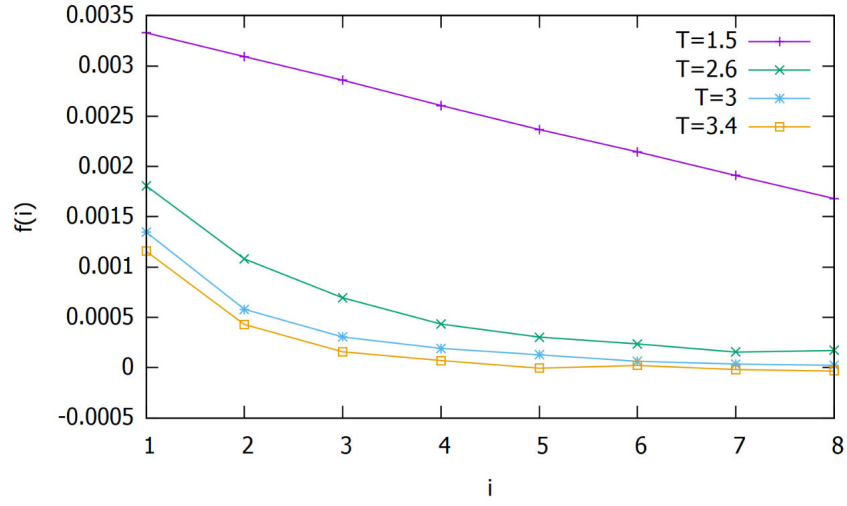


Figura 5: Función de correlación con $N=16$ para diferentes temperaturas.

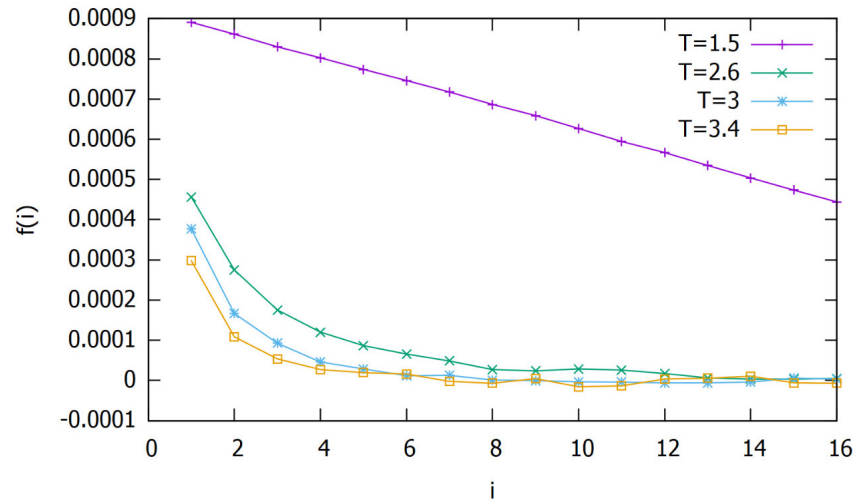


Figura 6: Función de correlación con $N=32$ para diferentes temperaturas.

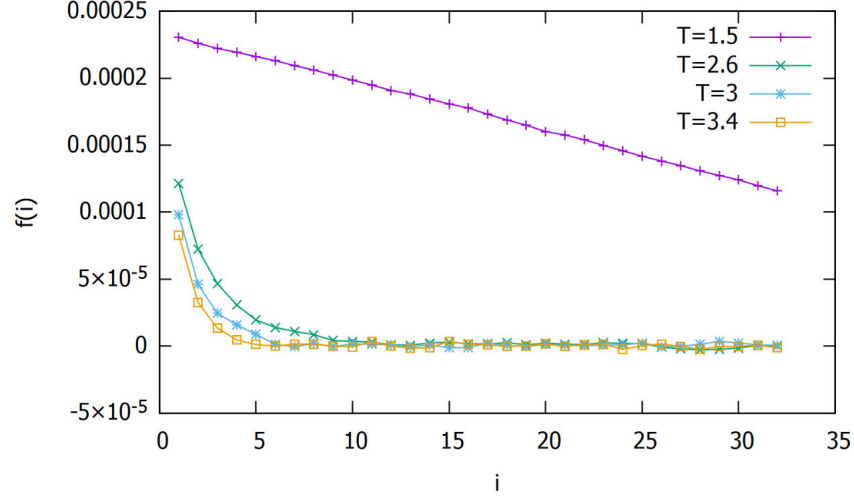


Figura 7: Función de correlación con $N=64$ para diferentes temperaturas.

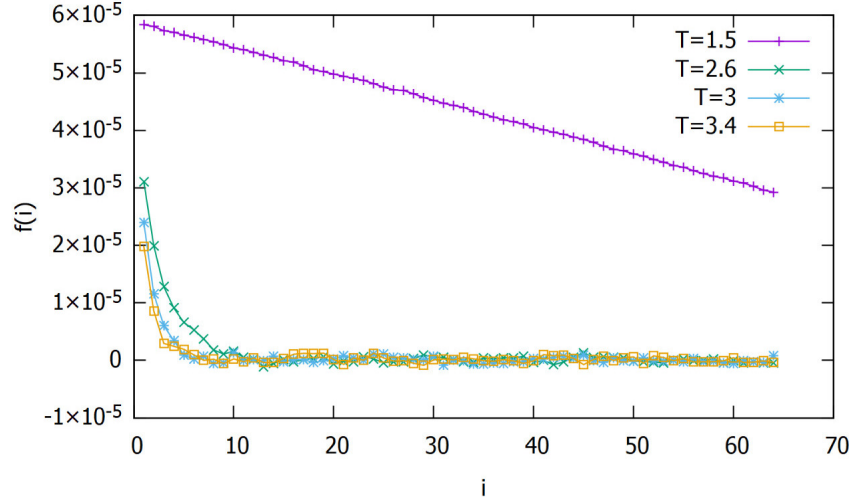


Figura 8: Función de correlación con $N=128$ para diferentes temperaturas.

Al estudiar todas las representaciones vemos que en todas se cumple que al aumentar i , disminuye $f(i)$, cosa bastante coherente con lo esperado teóricamente, pues la función de correlación tiende a 0 en el infinito.

Si nos fijamos en las distintas temperaturas también vemos que mientras más alto sea este valor más rápido converge a 0 la función de correlación, este de nuevo es un resultado bastante coherente pues a más altas temperaturas desaparecerá el orden inicial que tenemos.

Por último si nos fijamos en la dependencia en N , lo que observamos al igual que en los resultados anteriores es que a mayor N más precisos son los resultados.

3.2. Exponentes críticos y longitud de correlación.

Para obtener el valor del exponente crítico de magnetización β , vamos a realizar un ajuste de la magnetización en función de la temperatura de los datos anteriores (cabe destacar que cogemos el valor $N=128$ porque tal y como hemos explicado previamente es el más cercano al teórico). La forma de la función será:

$$f(x) = (A - B \sin^{-4}(\frac{2}{T}))^C \quad (22)$$

Dónde $x=T$ y $f(x)=M(T)$ y C será el exponente crítico que buscamos(β).

Realizando el ajuste obtenemos para las temperaturas menores a la crítica obtenemos un valor de $\beta = 0,12621 \pm 0,00008$.

Ahora para obtener el coeficiente ν usaremos la relación teórica antes vista en la que veíamos que el pico de la posición escalaba como $N^{1/\nu}$ y vamos a realizar un ajuste lineal de los valores de T_c que hemos obtenido antes para cada uno de los N y viendo el resultado obtenemos un valor del coeficiente de $\nu = 1$, lo que coincide con lo esperado.

Para estudiar la longitud de correlación vamos a hacer uso de su definición. La longitud de correlación se define como la distancia necesaria para que la función correlación disminuya 0.368. Hemos hecho uso de la gráficas del apartado anterior para sacar conclusiones.

Sería complicado obtener un resultado representativo en sí, pero observando las diferentes gráficas podemos concluir que si la temperatura es baja el valor de la longitud será mayor, y en cambio si la temperatura supera su punto crítico la longitud de correlación será menor.

Referencias

- [1] The Hobbyhorse of Magnetic Systems: The Ising Model
- [2] <https://es.wikipedia.org/wiki/ModelodeIsing>
- [3] <http://valbuena.fis.ucm.es/expint/html/fises/ising/ising.html>
- [4] Estudio de Transiciones de Fase en Redes con Interacciones de Largo Alcance Tesis que presenta Marcia Vianey Bojórquez Avitia
- [5] <https://ergodic.ugr.es/cphys/LECCIONES/ising/ising-SLIDES.pdf>