

Voluntario 2: Simulación del modelo de Ising con la dinámica de Kawasaki

Usar el algoritmo de Metropolis explicado en clase para simular y estudiar las propiedades de un modelo de Ising en dos dimensiones mediante la dinámica de Kawasaki.¹

La dinámica de Kawasaki, a diferencia de la explicada en clase (conocida como dinámica de Glauber o spin-flip), consiste en escoger un par de espines vecinos al azar e *intercambiar* sus valores con la probabilidad dictada por el algoritmo de Metropolis. Este pequeño cambio introduce notables diferencias respecto a la dinámica de Glauber, ya que en este caso la magnetización inicial es conservada por la dinámica. Sin embargo, para una magnetización inicial nula, seguimos teniendo, por debajo de la temperatura crítica, una transición de fase continua, obteniendo dominios aproximadamente de igual tamaño y de magnetización no nula (por tanto con signos contrarios para que la magnetización total siga siendo cero). Por el contrario, para una magnetización inicial no nula, esta dinámica da lugar a una transición de fase discontinua por debajo de cierta temperatura, dando lugar a la coexistencia de dominios de magnetización (positiva y negativa) de distintos tamaños.

El Hamiltoniano o la energía de cada configuración de espines es la expresión dada en los apuntes de clase, es decir,

$$E(C) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s_{i,j} (s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1})$$

Sin embargo, dado que la nueva dinámica intercambia el valor de un par de espines vecinos, la diferencia de energía entre ambas configuraciones (energía de la configuración final menos energía de la configuración inicial), ΔE , ya no se corresponde con la de los apuntes de clase, por lo que se tendrá que calcular su expresión explícitamente para hacer que la simulación sea más eficiente.

Se pide simular esta dinámica usando el algoritmo de Metropolis, es decir con $P_{C \rightarrow C'} = \min(1, e^{-\beta \Delta E})$, donde $\Delta E = E(C') - E(C)$ y $\beta = 1/T$ es la inversa de la temperatura (donde hemos considerado la constante de Boltzmann igual a la unidad $k_B = 1$). Inicialmente se usarán condiciones de contorno periódicas en ambas direcciones para ver la evolución del sistema para diferentes temperaturas y partiendo con varios valores de la magnetización. Sin embargo, para facilitar la observación de los dominios magnéticos pondremos condiciones de contorno periódicas sólo en la dirección “ x ” mientras que fijaremos los espines en los bordes de la dirección “ y ”, como se indica en la Figura 1.

A continuación se enumeran las actividades a realizar (como mínimo) tomando inicialmente una magnetización nula:

1. Simular para varios valores de la temperatura la dinámica de este modelo. Representar varios fotogramas asociados a varias temperaturas.
2. Obtener la curva de magnetización por partícula calculada ‘por dominios’ como función de la temperatura para varios tamaños del sistema (e.g. $N = 32, 64, 128$) promediando sobre un número suficiente de pasos Monte Carlo para que el error sea razonablemente pequeño. Dicho promedio ‘por dominios’ se realiza –en caso de una magnetización inicial nula– calculando la magnetización *en cada una de las mitades (superior e inferior)* del sistema.

¹Una descripción en detalle del algoritmo de Kawasaki viene en el libro *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, de M.E.J. Newman y G.T. Barkema. El estudiante interesado puede realizar además de las actividades aquí propuestas aquellas que se incluyen en el capítulo 5 de dicho libro.

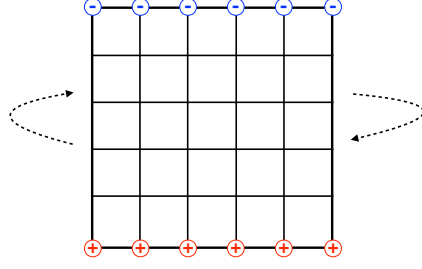


Figure 1: **Condiciones de contorno a tener en cuenta para realizar las simulaciones**

3. Calcular la densidad de partículas media en la dirección y como función de la temperatura y para diferentes tamaños.
4. Calcular la energía media por partícula como función de la temperatura para los diferentes tamaños.
5. Calcular densidad de partículas promedio en la dirección y para varias temperaturas.
6. Calcular el calor específico a partir de las fluctuaciones de la energía,

$$c_N = \frac{1}{N^2 T^2} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2]$$

como función de la temperatura para los diferentes tamaños y determinar la temperatura crítica. Para estimar dicha temperatura se ha de obtener, para cada valor del tamaño N , el máximo del calor específico, $T_c(N)$, y estudiar su comportamiento con N para extrapolar su valor en el límite $N \rightarrow \infty$.

7. Calcular la susceptibilidad magnética a partir de las fluctuaciones de la magnetización en cada dominio,

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

y determinar la temperatura crítica. Para estimar dicha temperatura se ha de obtener, para cada valor del tamaño N , el máximo de la susceptibilidad magnética, $T_c(N)$, y estudiar su comportamiento con N para extrapolar su valor en el límite $N \rightarrow \infty$.

8. Realizar los puntos 1-6 anteriores partiendo de una magnetización no nula. Recordemos que la magnetización por partícula puede tomar valores entre -1 y 1 , i.e. $m \in [-1, 1]$. Por tanto si fijamos $m = m_0$ el promedio ‘por dominios’ de la magnetización se realizará, en este caso, promediando por separado la fracción $x = (1 + m_0)/2$ (con $x \in [0, 1]$) inferior del sistema, y la fracción $1 - x$ superior del mismo. De esta manera, para $T \rightarrow 0$, tendremos:

$$m = x(+1) + (1 - x)(-1) = m_0.$$

Observamos que si $m_0 = 0$ tenemos que $x = 1/2$, es decir, tenemos que promediar la magnetización por separado en la mitad inferior y en la mitad superior del sistema, como habíamos explicado en el punto 2. Representar la curva de magnetización frente a temperatura y comprobar que es discontinua por debajo de una temperatura crítica. Dicha discontinuidad se hará más pronunciada conforme el tamaño del sistema sea mayor.