Fenòmens Col.lectius i Transicions de Fase

Pràctica 4

promitjos en funcio de T
Dependència amb L
Extrapolació a $L \to \infty$

EV-12-12-2020

Objectius

Explotar el codi `MC2.f` per obtenir el comportament del paràmetre d'ordre, l'energia, la capacitat calorífica i la susceptibilitat en funció de la temperatura pel model d'Ising 2D amb una certa mida `L`

Estudiar la dependència amb `L`, i com podem extrapolar els resultats al sistema infinit

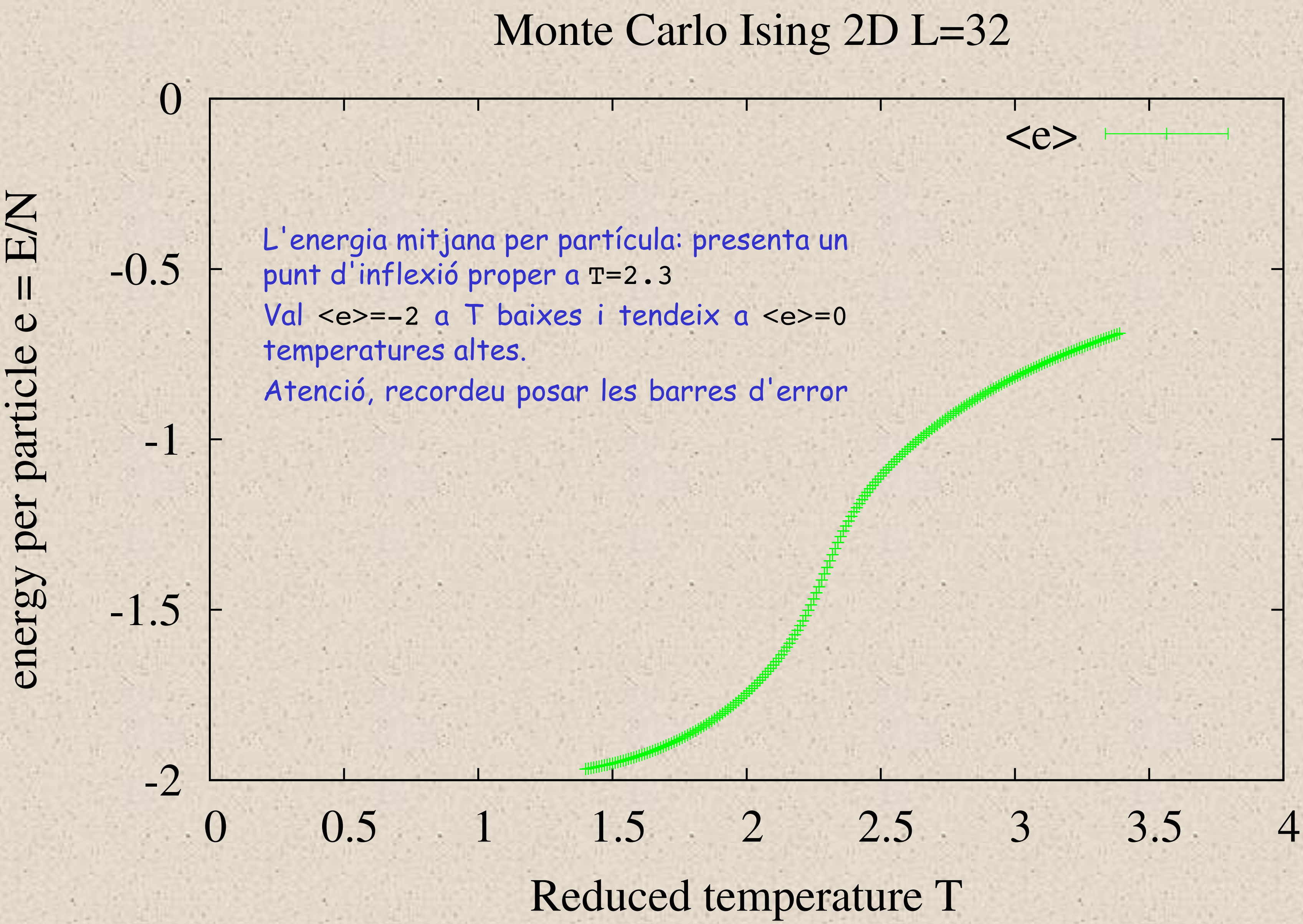
L'exemple que mostrem a continuació correspon a

```
L=32, MCS=40000, MCINI=2000, MCD=20, NLLAV=200
T=1.40,1.41,1.42,... 3.40
```

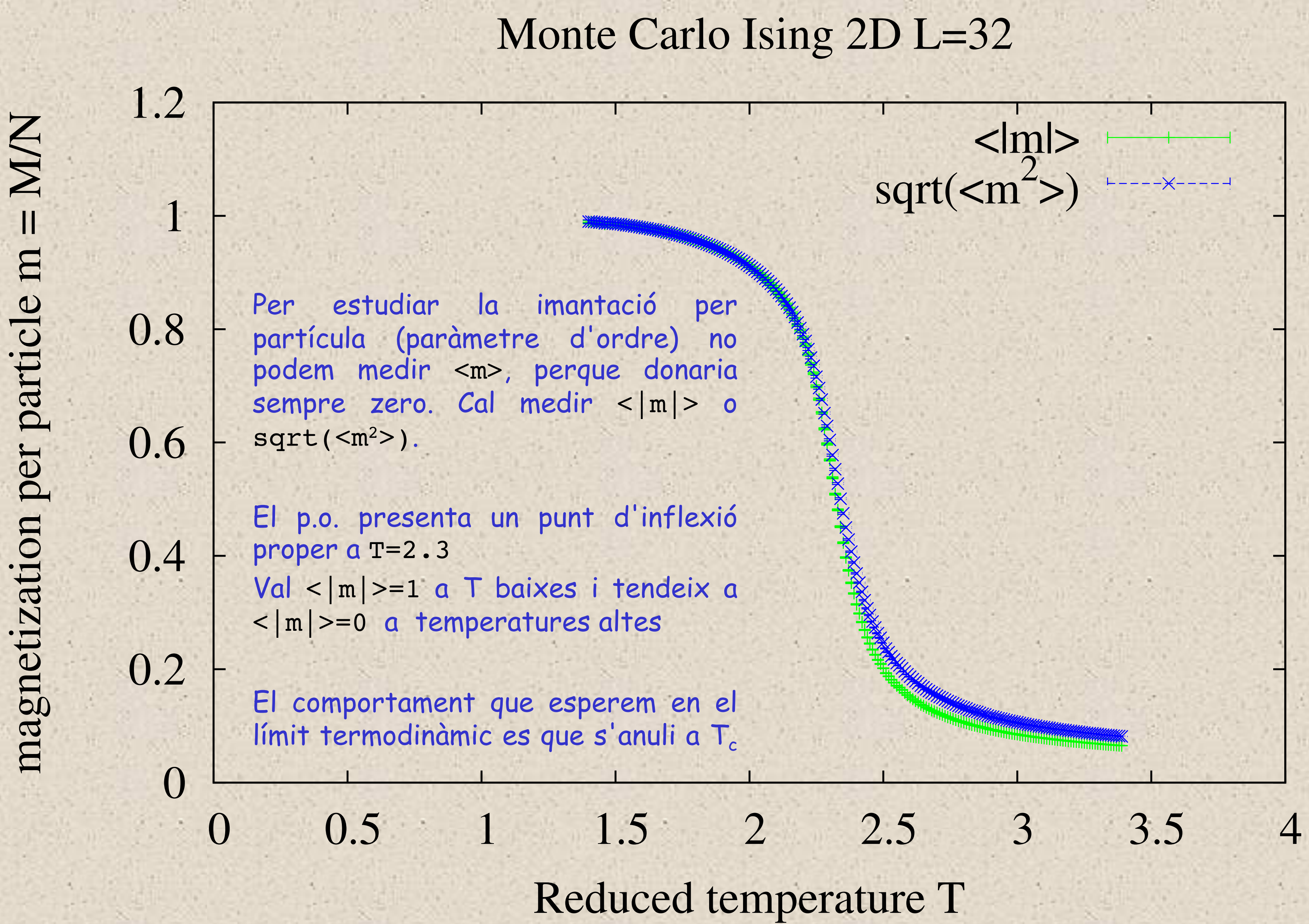
Equival a promitjar sobre 380000 configuracions per cada una de les 200 temperatures.

Ha trigat uns 66500 s de CPU en un 2,8GHz Intel Core i7

L=32 Resultats <e>



L=32 Resultats <m>



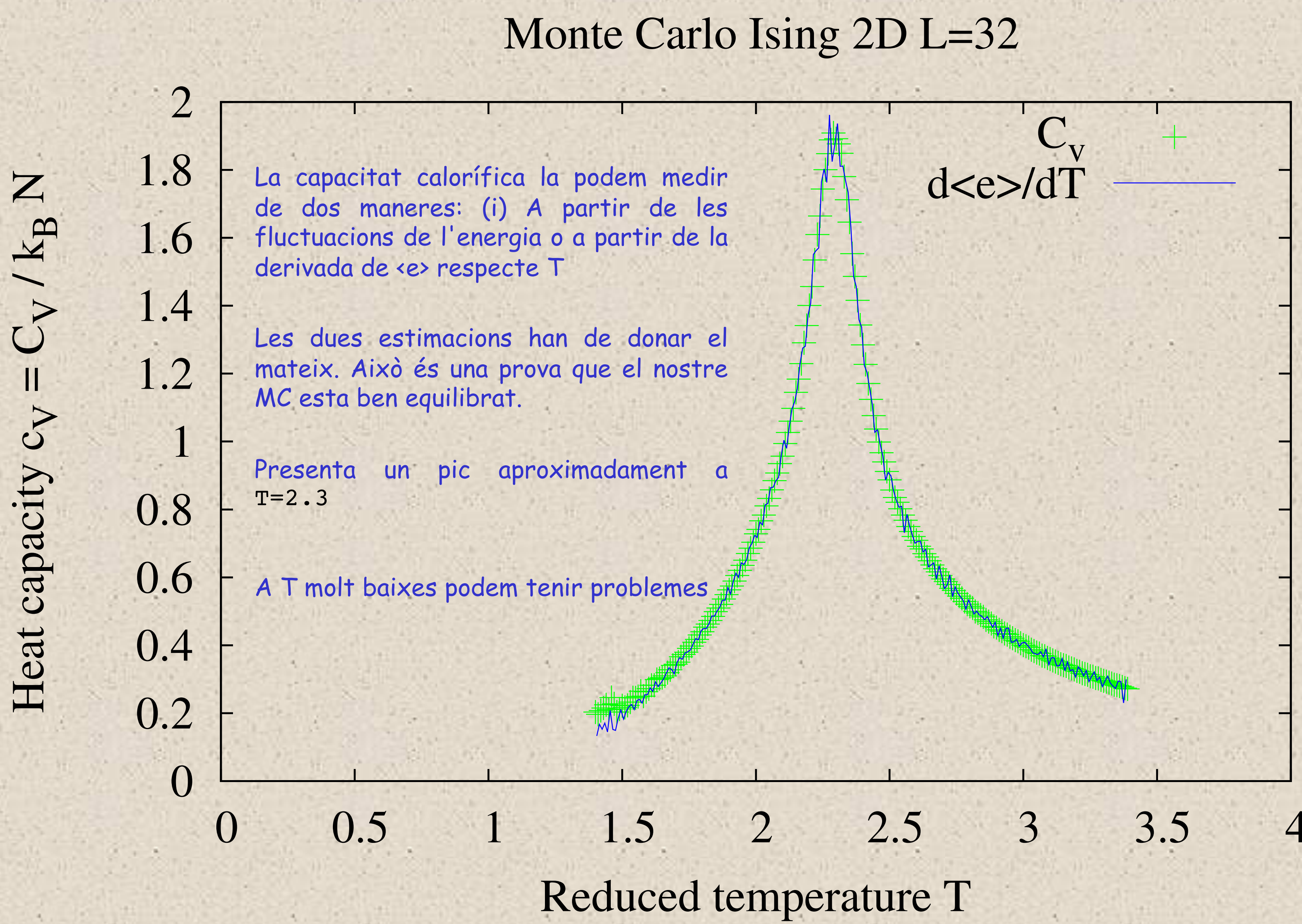
Per estudiar la imantació per partícula (paràmetre d'ordre) no podem medir <m>, perque donaria sempre zero. Cal medir <|m|> o sqrt(<m^2>).

El p.o. presenta un punt d'inflexió proper a T=2.3

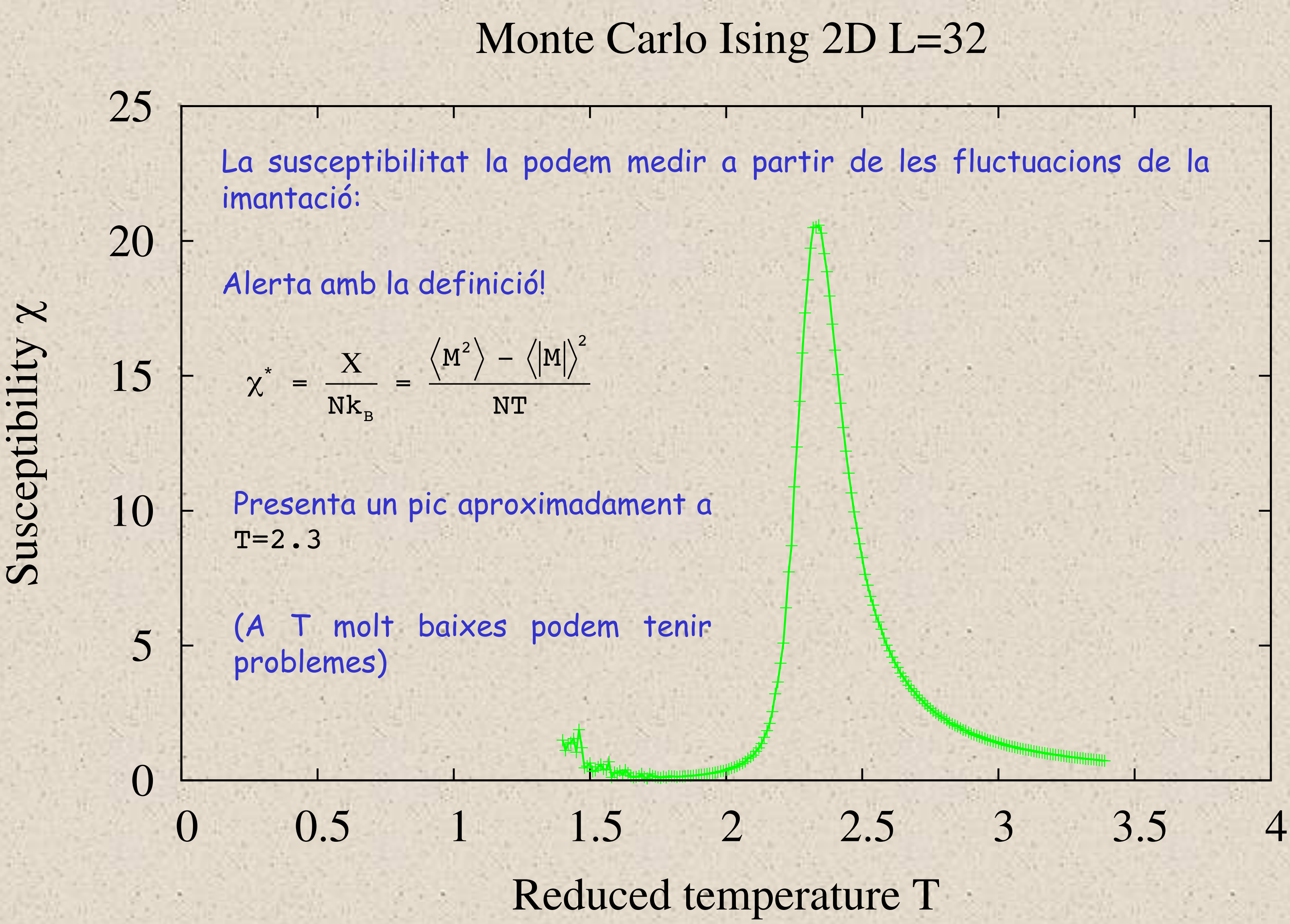
Val <|m|>=1 a T baixes i tendeix a <|m|>=0 a temperatures altes

El comportament que esperem en el límit termodinàmic es que s'anuli a T_c

L=32 Resultats C_v



L=32 Resultats χ



La susceptibilitat la podem medir a partir de les fluctuacions de la imantació:

Alerta amb la definició!

$$\chi^* = \frac{X}{Nk_B} = \frac{\langle M^2\rangle - \langle |M|\rangle^2}{NT}$$

Presenta un pic aproximadament a T=2.3

(A T molt baixes podem tenir problemes)

Dependència amb L

El segon objectiu és estudiar la dependència amb `L` i intentar extrapolar els resultats al límit termodinàmic. Per fer-ho s'han de fer càlculs per diferents `L`'s:

`L=8, 16, 32 i 64`

Donat que les simulacions per `L`'s grans son molt costoses, convé escollir be les temperatures que estudiem. Ens centrarem en el punt crític, prop del punt d'inflexió i prop dels màxims de C_v i χ.

Per intentar entendre la dependència amb L convé recordar alguns conceptes de fenòmens crítics.

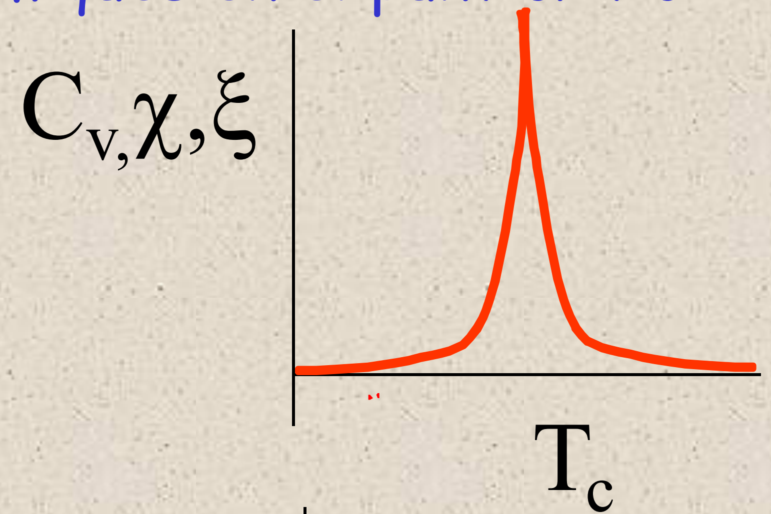
Fenòmens Crítics

- Exponents crítics: Caracteritzen el comportament no analític de les variables termodinàmiques en el punt crític

$$\xi = A\left|T - T_c\right|^{-\nu}\left(1 + B(T - T_c) + ...\right)$$

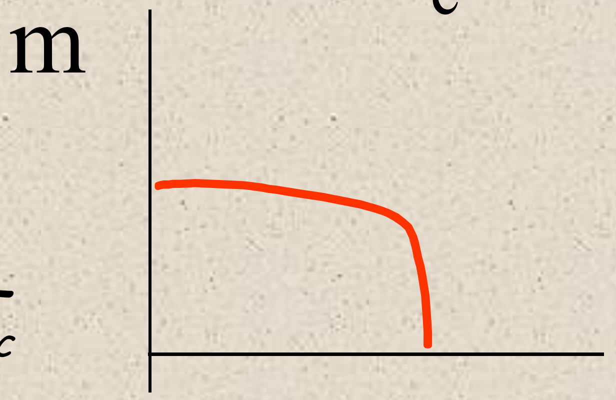
$$C_v = A\left|T - T_c\right|^{-\alpha}\left(1 + B(T - T_c) + ...\right)$$

$$\chi = A\left|T - T_c\right|^{-\gamma}\left(1 + B(T - T_c) + ...\right)$$



$$m = \begin{cases} A(T_c - T)^{\beta}\left(1 + B(T - T_c) + ...\right) & T < T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases}$$

$$m = A\left|H - H_c\right|^{\frac{1}{\delta}}\left(1 + B(H - H_c) + ...\right) \quad T = T_c$$



- Els exponents tenen valors universals

Exponents Crítics Ising

$$\xi = A\left|T - T_c\right|^{-\nu}$$

$$C_v = A\left|T - T_c\right|^{-\alpha}$$

$$\chi = A\left|T - T_c\right|^{-\gamma}$$

$$m = A\left(T_c - T\right)^{\beta} \quad T < T_c$$

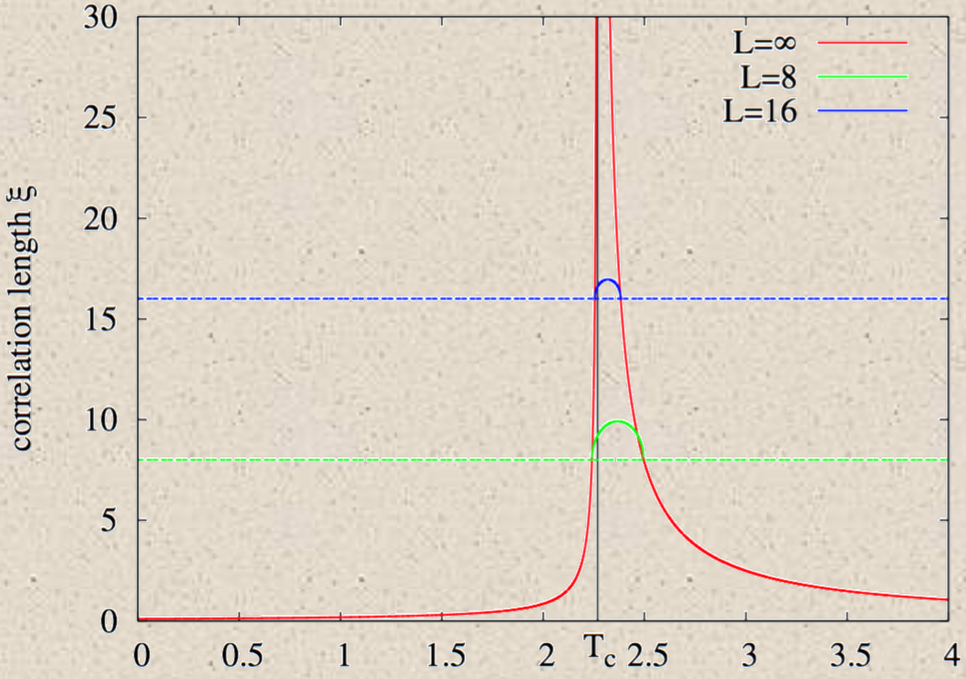
$$m = A\left|H - H_c\right|^{\frac{1}{\delta}} \quad T = T_c$$

exponent	2D	3D
ν	1	0.629971
α	0	0.11008
γ	7/4	1
β	1/8	0.326419
δ	15	4.78984

$$T_c = \frac{2}{\ln\left(1 + \sqrt{2}\right)} = 2.2691853..$$

Efectes pseudocrítics en sistemes finits

- En sistemes finits no existeix comportament crític
- Les simulacions reprodueixen bé el comportament fins que $\xi_L = L$ (o KL)



Observarem efectes pseudocrítics a una temperatura T_{cL}, que correspondrà a:

$$\xi = A\left|T - T_c\right|^{-\nu} = kL$$

Per tant:

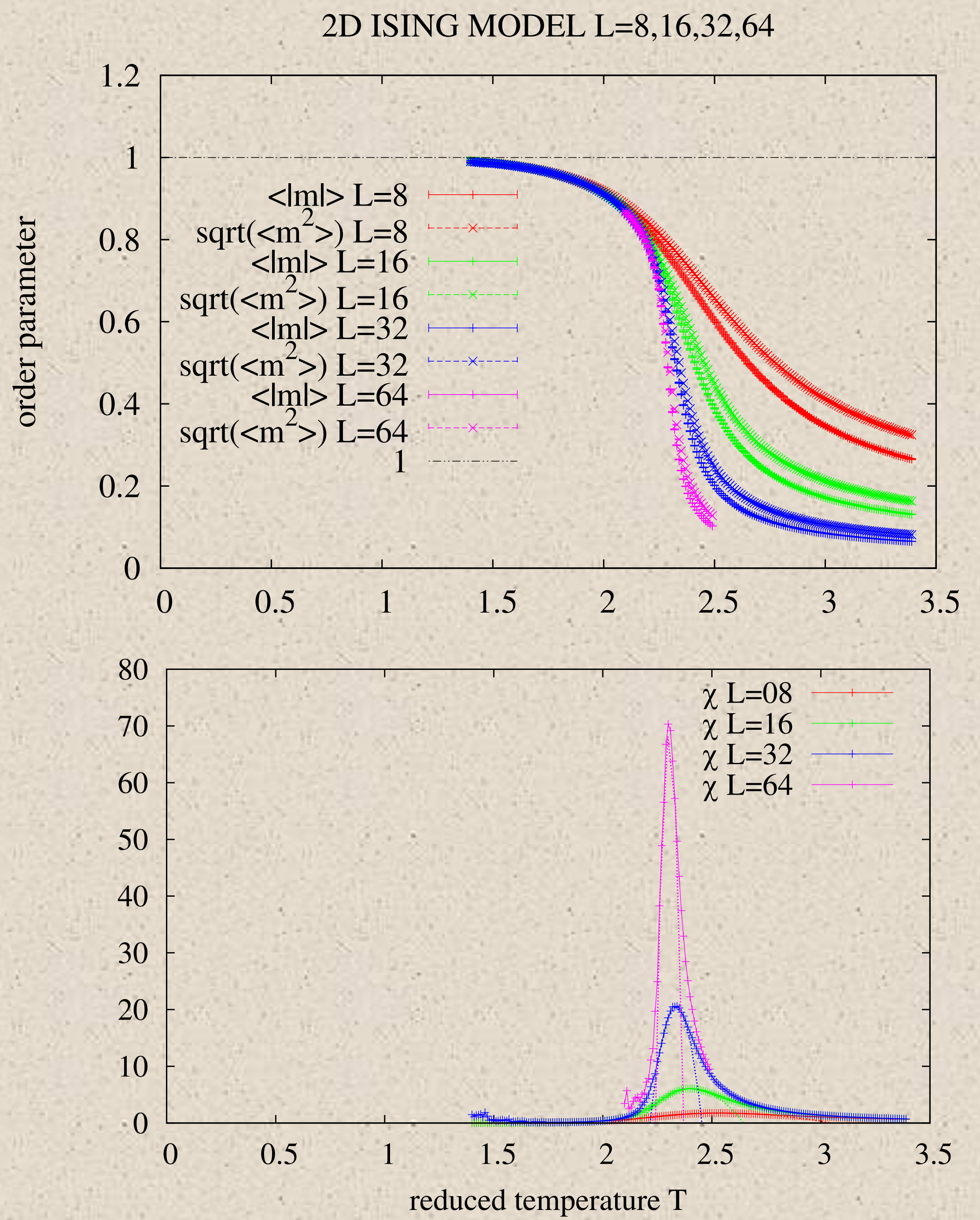
$$\left|T_{cL} - T_c\right|^{-\nu} = CL \qquad T_{cL} = T_c + DL^{-\frac{1}{\nu}}$$

Resultats per diferents L's

- Comportament de l'imantació i la susceptibilitat
- El punt d'inflexió i el màxim es desplacen en augmentar L

- Estimarem la posició dels màxims i/o dels punts d'inflexió ajustant polinomis o a "ull"

- Així obtindrem famílies de Tc(L), estimades a partir de diferents propietats

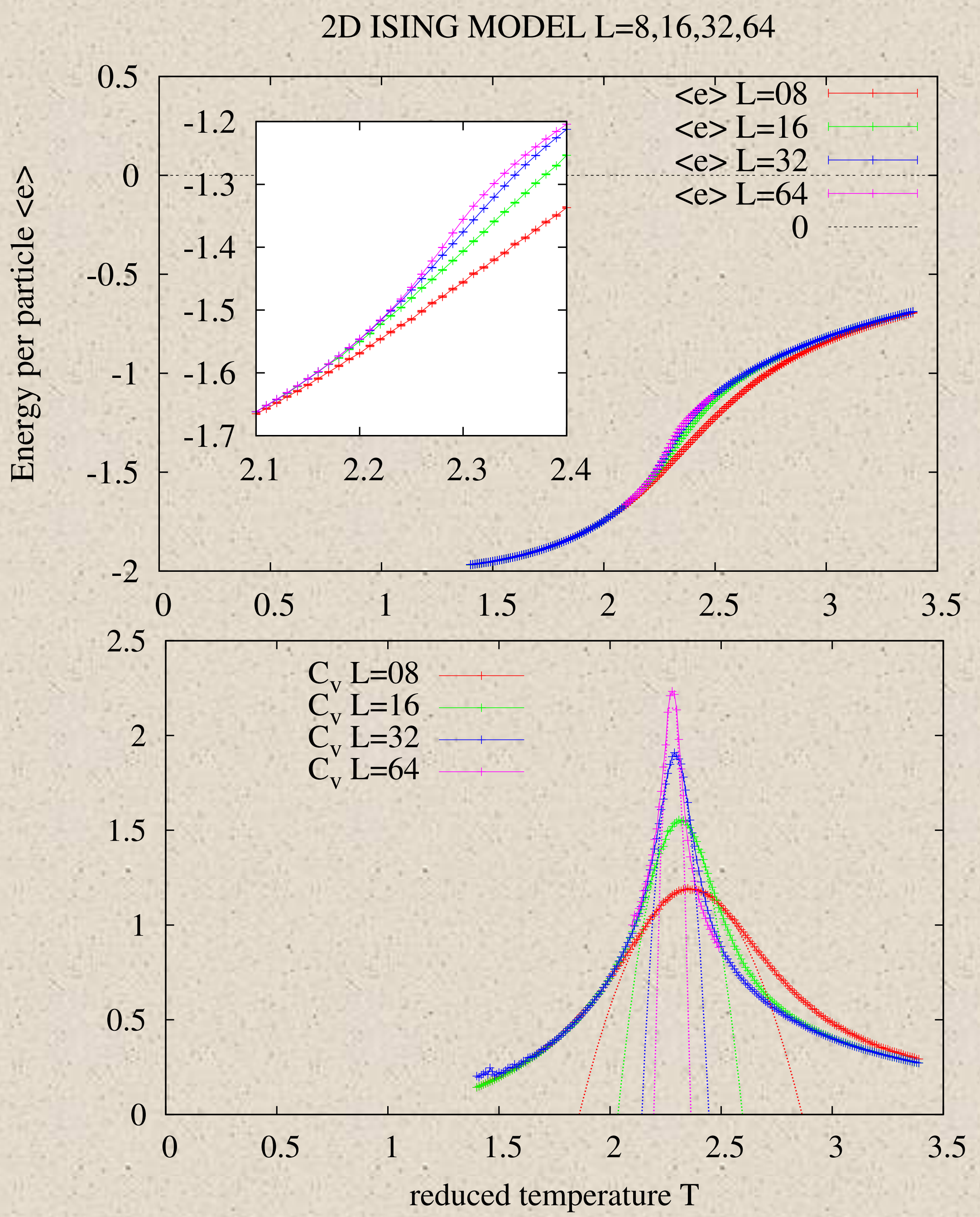


Resultats per diferents `L`'s

- Comportament de l'energia i la capacitat calorífica
- El punt d'inflexió i el màxim es desplacen en augmentar `L`

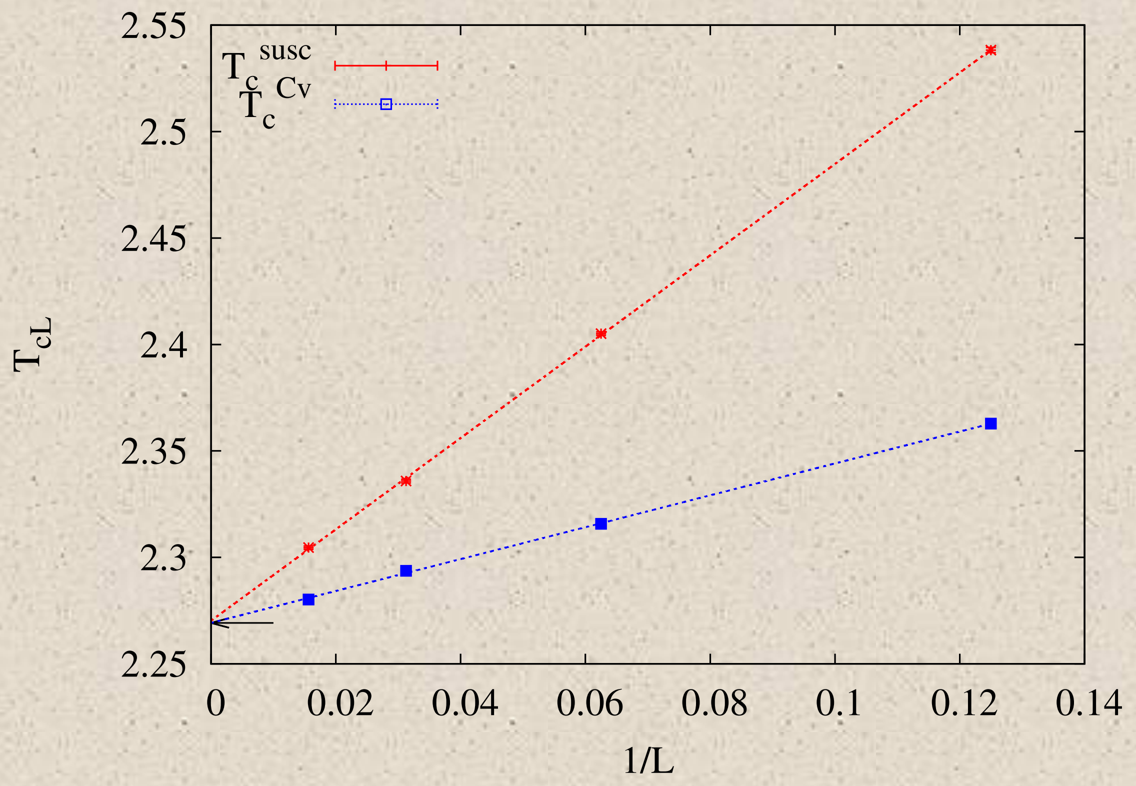
- Estimarem la posició dels màxims i/o dels punts d'inflexió ajustant polinomis o a "ull"

- Així obtindrem famílies de `Tc(L)`, estimades a partir de diferents propietats



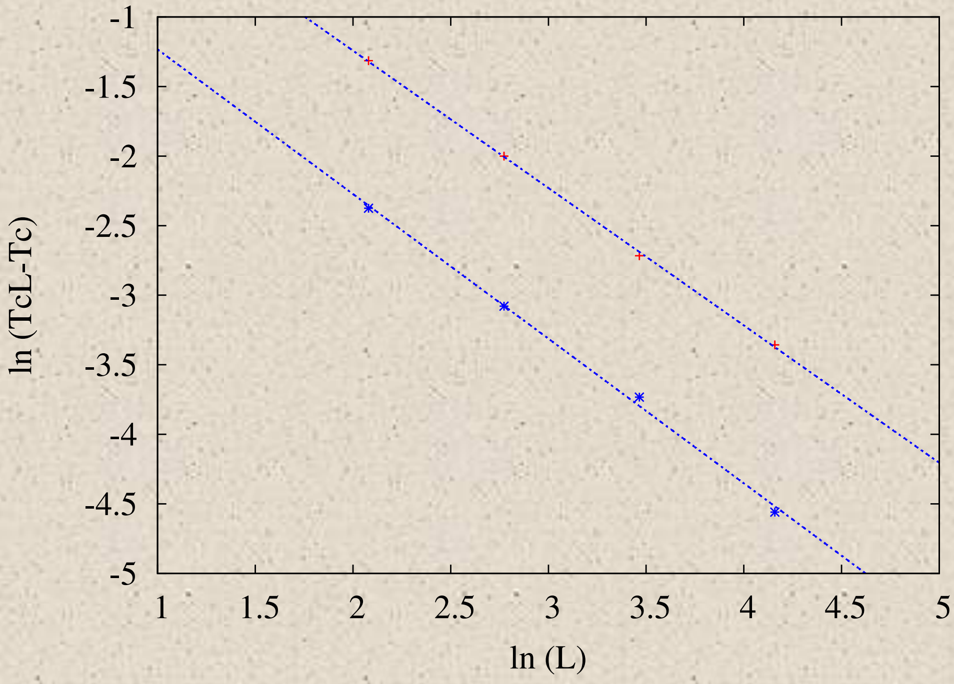
Comportament de T_{cL}

- En funció de `1/L` per extrapolar (en aquest cas el comportament es lineal, de casualitat perque ν=1)
- Les extrapolacions donen molt bé. (2.27025, 2.26924)



Comportament de T_{cL}

- Un cop tenim T_c, podem dibuixar log (T_{cL}-T_c) contra log L per trobar l'exponent -1/ν
- Ho podem agafant una T_c estimada promig de les anteriors $Tc \simeq 2.269745$
- També ho podeu fer amb la T_c=2.2691853142 correcta (que en aquest cas coneixem)
- Els pendents resulten: $-1/\nu=-0.99\pm 0.014$ i $-1/\nu=-1.04\pm0.04$



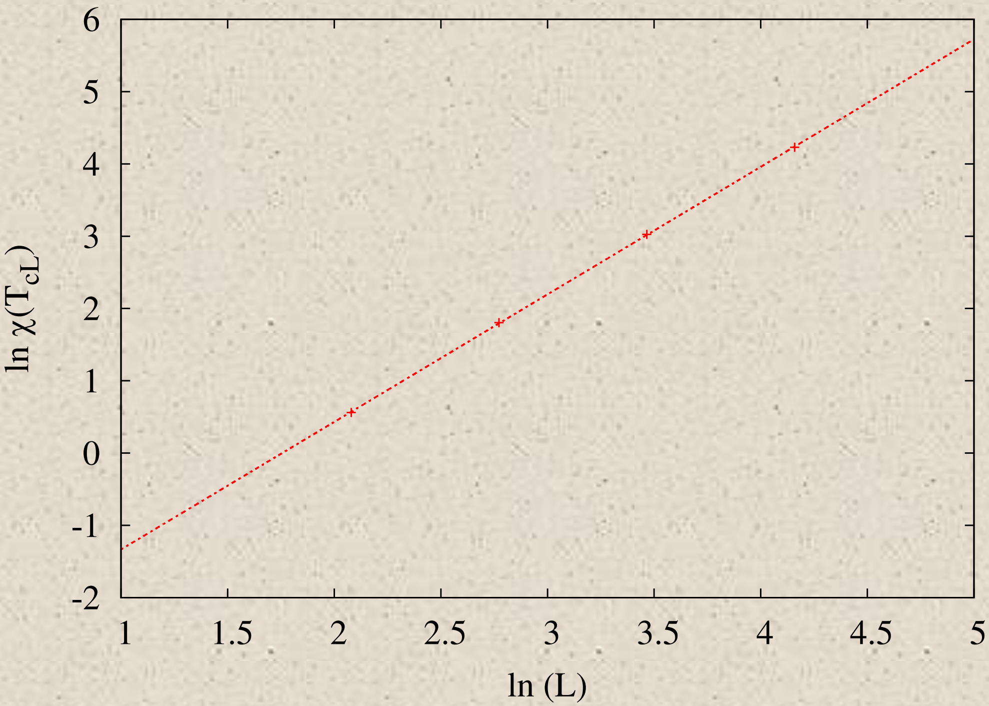
Com estimar γ

- Un cop tenim T_c i ν podem estimar els altres exponents crítics. Per exemple a partir del comportament de l'alçada dels pics de la susceptibilitat que hem obtingut ajustant les paràboles

$$\chi = A\left|T - T_c\right|^{-\gamma} \qquad \chi\left(T_{cL}\right) = A\left|T_{TcL} - T_c\right|^{-\gamma} = A\left(CL^{-\frac{1}{\nu}}\right)^{-\gamma} = BL^{\frac{\gamma}{\nu}}$$

S'obté: γ/ν=1.76446

El valor exacte és:
γ/ν=7/4=1.75



Finite Size Scaling (0)

Existeix una tècnica més adequada per corregir els efectes de mida finita. Per comptes d'estudiar el comportament del pic de X i Cv, s'estudia el comportament de totes les funcions X,Cv o $\langle|M|\rangle$

Es pot fonamentar de dues maneres

1) Arguments de analiticitat de les funcions termodinàmiques pels sistemes finits

2) Estudi de les quantitats invariants sota l'acció del GR

Finite Size Scaling (1)

J.K Kim, PRL 70, 1735 (1993)

Hipòtesi: Una propietat termodinamica P que divergeixi en el punt crític com $P_\infty(t) \sim t^{-\rho}$, pels sistemes finits serà analítica i es comporta com:

$$\frac{P_L(t)}{P_\infty(t)} = f_P\left(\frac{L}{\xi_\infty(t)}\right)$$

on $t = \frac{T - T_c}{T_c}$

$$P_L(t) = At^{-\rho}\left[1 + Bt + Ct^2 + \cdots\right] f_P\left(\frac{L}{Dt^{-\nu}\left[1 + Et + Ft^2 + \cdots\right]}\right)$$

Donat que $P_L(t)$ és analítica, es pot desenvolupar com

$$P_L(t) = P_L(0) + \left.\frac{dP_L(t)}{dt}\right|_0 t + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2P_L(t)}{dt^2}\right|_0 t^2 + \cdots$$

Finite Size Scaling (2)

La analiticitat de P_L força la forma de f_P

$$P_L(0) = Lim_{t\to 0} A t^{-\rho} f_P\left(\frac{L}{D} t^{\nu}\right) = p_0 L^{\rho/\upsilon}$$

ja que f_P forçosament ha d'anar com

$$f_p(x) \approx x^{\rho/\upsilon}$$

Per tal de compensar la divergencia amb $t^{-\rho}$. De manera similar es pot investigar $P_L'(0)$. El terme que inclogui f_P' serà

$$\ldots + A t^{-\rho}\left[1 + Bt + Ct^2 + \cdots\right] f_P'\left(\frac{L}{D t^{-\nu}\left[1 + Et + Ft^2 + \cdots\right]}\right)\left(L t^{\upsilon-1} + \ldots\right) =$$

$$= \ldots + L t^{-\rho+\upsilon-1}\left(L t^{\upsilon}\right)^{\frac{\rho-\upsilon+1}{\upsilon}} + \ldots = \ldots + L^{\rho/\upsilon}(L^{1/\upsilon}) + \ldots$$

S'arriba, per tant a:

$$P_L(t) = L^{\rho/\upsilon}\left[p_0 + p_1 L^{1/\upsilon} t + p_2 L^{2/\upsilon} t^2 + \ldots\right] = L^{\rho/\upsilon}\psi_P(L^{1/\upsilon} t)$$

Finite Size Scaling (3)

- Les magnituts amb comportaments no analítics en el punt crític es comportaran com:

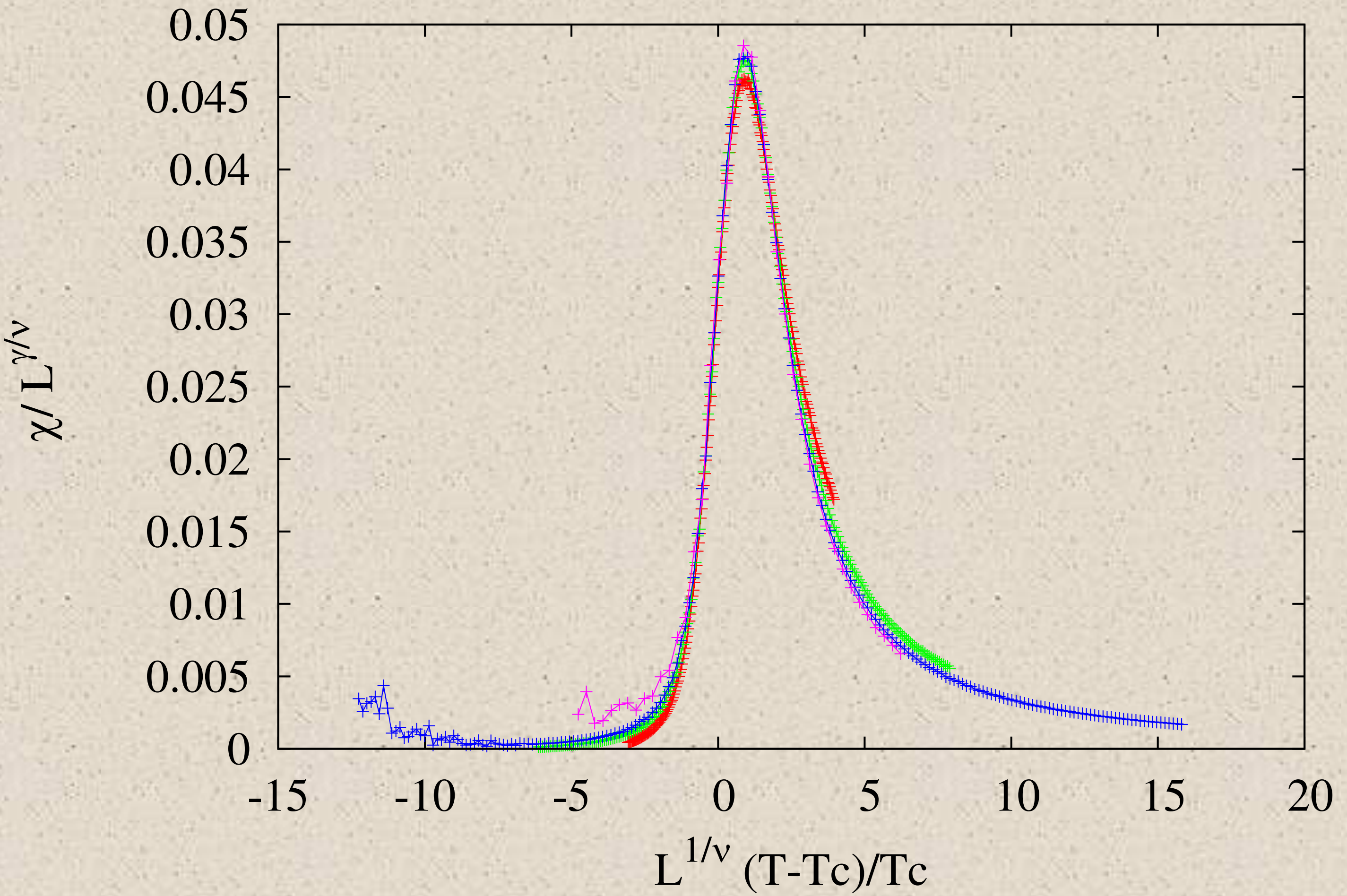
$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu} \Longrightarrow \xi_L \propto L\psi\left[\frac{T - T_c}{T_c} L^{1/\nu}\right]$$

$$\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma} \propto \xi^{\gamma/\nu} \Longrightarrow \chi_L \propto L^{\gamma/\nu}\Psi\left[\frac{T - T_c}{T_c} L^{1/\nu}\right]$$

$$\langle|m|\rangle \propto |T_c - T|^{\beta} \propto \xi^{-\beta/\nu} \Longrightarrow \langle|m_L|\rangle \propto L^{-\beta/\nu}\Psi\left[\frac{T - T_c}{T_c} L^{1/\nu}\right]$$

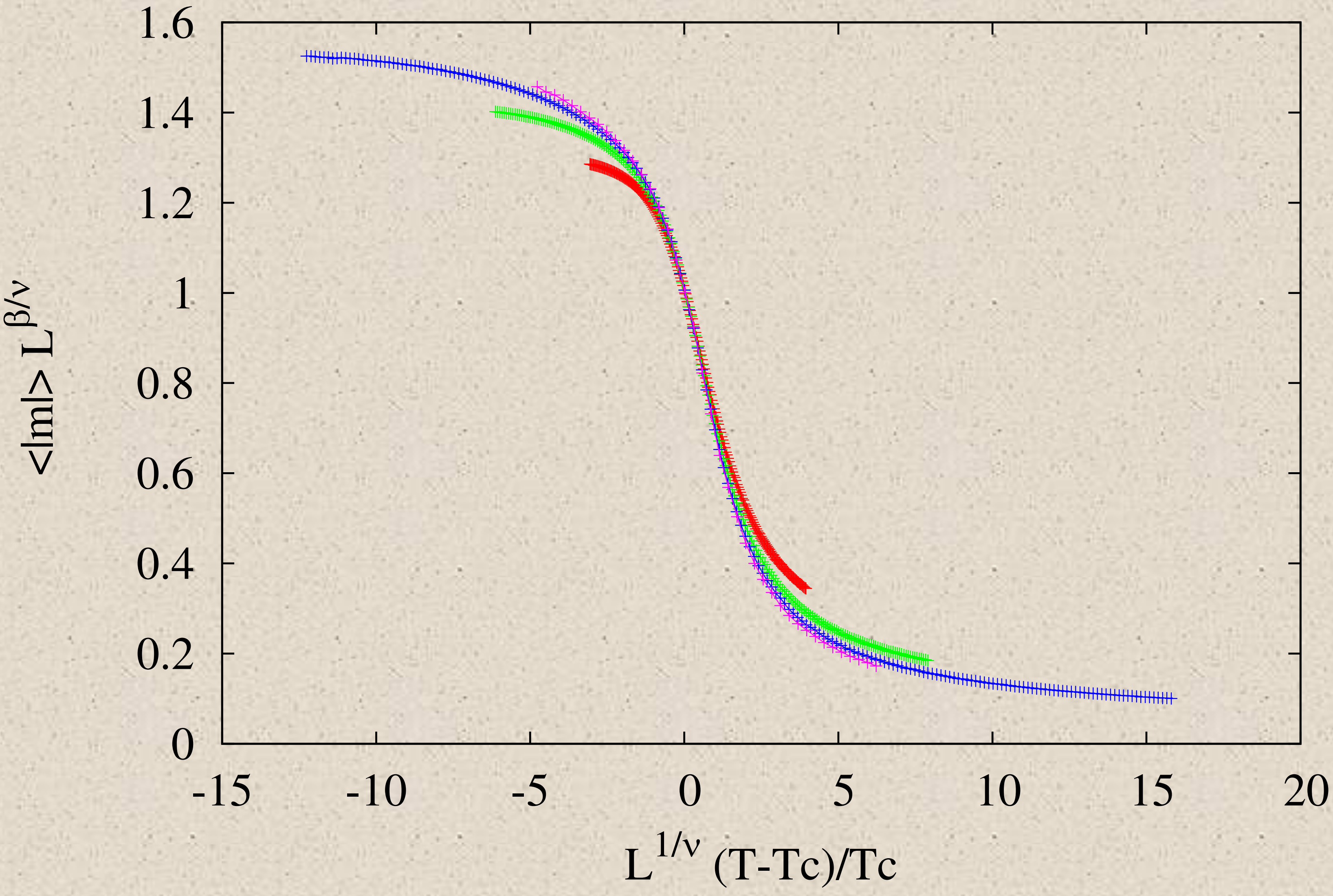
Test del finite size scaling

- Susceptibilitat



Test del finite size scaling

- Order parameter



Treball a entregar

El treball ha de ser individual, de màxim 12 pàgines (12 cares) i ha de presentar-se en un arxiu pdf.

Ha d'incloure

1-Introducció (màx. 1 cara)

2-Discussió de l'evolució "temporal" de magnetitzacions i energies a diferents temperatures. Opcionalment podeu discutir les configuracions finals a diferents temperatures.

3-Comportament de l'energia, el paràmetre d'ordre, la capacitat calorífica i la susceptibilitat amb la temperatura per un sistema de mida L=32. Cal incloure també la prova gràfica que les fluctuacions de l'energia i la derivada de l'energia respecte T son equivalents.

4-Discussió de l'efecte de variar la mida, com a mínim sobre la susceptibilitat i la capacitat calorífica, fent L=8,16,32 i 64

5- Determinar Tc, extrapolant d'alguna manera al sistema infinit.

6- Determinar exponents crítics i, optativament, comprovar FSS

7- Conclusions

8- Referències

Heu d'entregar també el codi fortran `MC2.f` (que compili i ben comentat).

L'entrega dels dos documents es fa pel campus virtual, abans del 22 de gener de 2021 a les 23:55.