

Modello di Ising

Monica Cesario

29 marzo 2025

1 Introduzione

E' stato eseguito uno studio numerico della transizione di fase ferromagnetica del modello di Ising classico in 2D usando un algoritmo Metropolis locale. In particolare si sono verificate la rottura spontanea di simmetria, gli esponenti critici e presentati alcuni problemi legati all'algoritmo.

2 Descrizione del modello

2.a Cenni teorici

In assenza di campo magnetico esterno il sistema è descritto dalla seguente Hamiltoniana:

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (1)$$

in cui J è la costante di accoppiamento degli spin s_i , con $J > 0$ nel caso ferromagnetico e $J < 0$ nel caso antiferromagnetico (in questo caso è stato fissato $J = 1$). Nella simulazione si studia un reticolo isotropo a maglie quadrate, con condizioni periodiche al contorno, in cui ogni variabile di spin occupa una posizione $i = (x, y)$ del reticolo e la sommatoria è fatta sulle coppie di siti primi vicini. Il modello di Ising in 2D presenta una transizione di fase del secondo ordine a temperatura finita $\beta_c = 1/T_c = 0.4406868...$. Detto σ il microstato del sistema, all'equilibrio termodinamico la probabilità che il sistema sia in una certa configurazione di spin è data dalla distribuzione di Boltzmann:

$$P[\sigma] \propto e^{-\beta E[\sigma]} \quad (2)$$

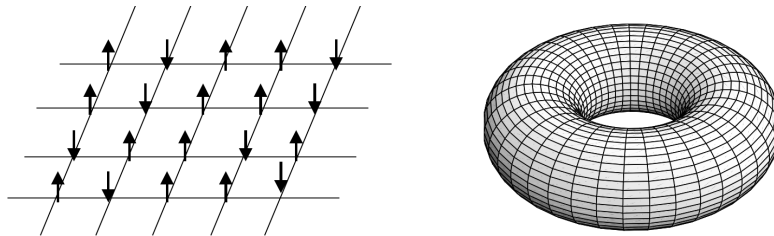


Figura 1: Un reticolo bidimensionale con condizioni periodiche al contorno può essere immaginato come un toro tridimensionale.

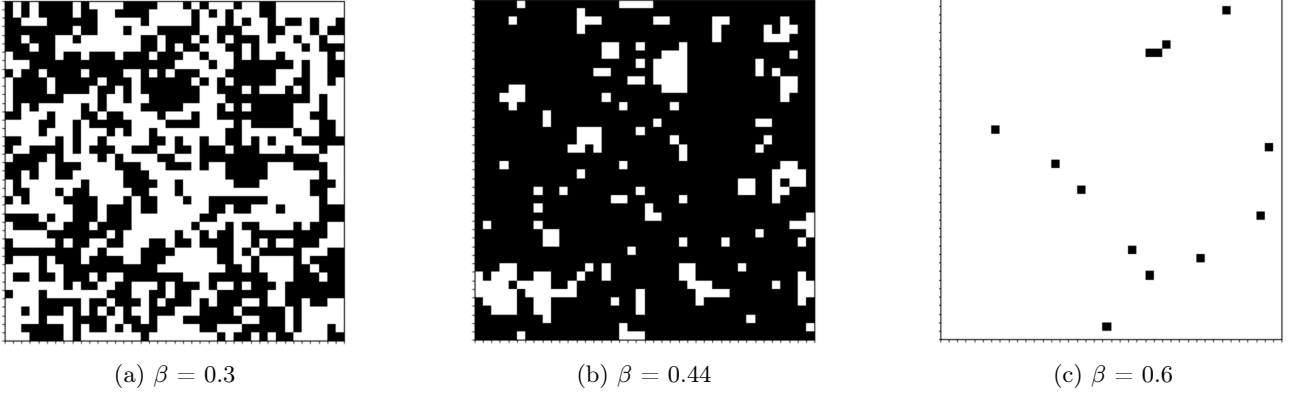


Figura 2: Configurazione di spin per un reticolo con $L = 40$ per tre valori della temperatura inversa, rispettivamente nella fase disordinata, vicino alla transizione e nella fase ordinata. Per il caso ferromagnetico l'energia diminuisce quando tutti gli spin sono allineati nella stessa direzione, l'aumento di temperatura porta ad un aumento di entropia, quindi modificando la temperatura possiamo controllare i due effetti e riprodurre la transizione di fase.

Il sistema gode di una simmetria globale $Z_2 : s_i \rightarrow -s_i \quad \forall i$

$$P[\sigma] = P[-\sigma]$$

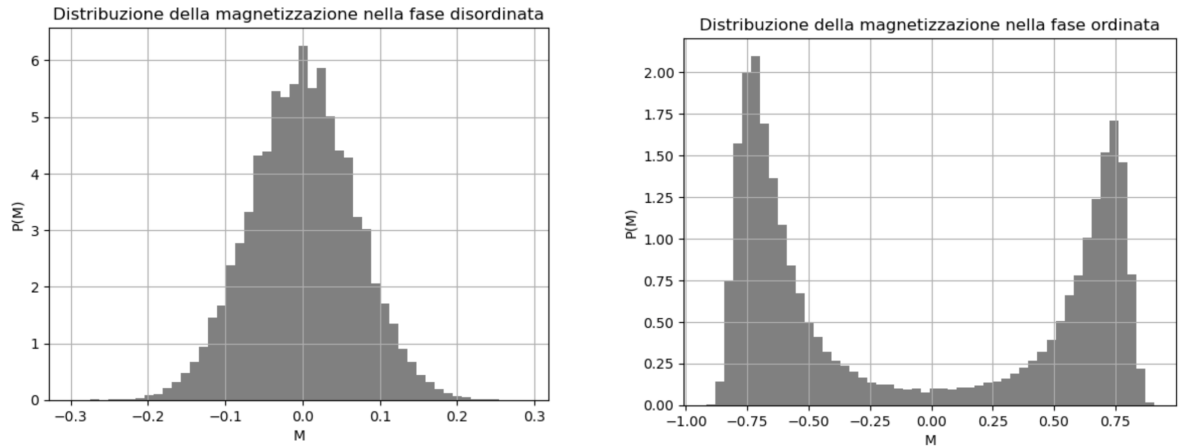
tale simmetria è rotta spontaneamente e si presenta come la comparsa di domini macroscopici con una magnetizzazione non nulla

$$\langle \sum_i s_i \rangle \neq 0$$

La magnetizzazione quindi è il parametro d'ordine per il modello di Ising essendo uguale a zero nella fase disordinata (temperatura superiore a quella critica) e diversa da zero nella fase ordinata (temperatura inferiore a quella critica). In entrambi i casi si ha:

$$\sum_{\sigma} P[\sigma] M[\sigma] = 0$$

quello che cambia è la distribuzione di probabilità della magnetizzazione M . Nella fase disordinata $\langle M(T) \rangle = 0$ e dal teorema limite centrale la distribuzione di probabilità è una gaussiana centrata in zero mentre nella fase ordinata $\langle M(T) \rangle = \pm \bar{M}$ si hanno due gaussiane centrate in $\pm \bar{M}$.¹



¹Poichè in entrambi i casi $\langle M \rangle = 0$, si usa $|M|$; questo fa perdere la natura di parametro d'ordine ad M che adesso non è più zero nemmeno nella fase disordinata; tuttavia nel limite termodinamico di reticolo infinito la distribuzione di M diventa una gaussiana con larghezza nulla, quindi anche considerando $|M|$ si ha sempre una quantità che tende a zero perché la distribuzione si concentra sempre di più attorno allo zero.

Dal punto di vista microscopico una caratteristica tipica delle transizioni di fase continue è la divergenza della lunghezza di correlazione ξ . Quando la lunghezza di correlazione diverge, la struttura microscopica del sistema diventa irrilevante per la determinazione delle proprietà macroscopiche, che assumono un carattere di universalità diventando dipendenti solo da alcuni aspetti generali dell'interazione, come le simmetrie e la dimensione del modello. Per specificare le caratteristiche di una transizione di fase si introducono dei parametri detti indici critici, alcuni di questi per il modello di Ising sono definiti da:

$$\begin{aligned}\alpha : C(T) &\equiv \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} \propto V(\langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2) \propto |t|^{-\alpha} \\ \beta : T &\leq T_c, \quad \langle M(T) \rangle \propto |t|^\beta \\ \gamma : \chi(T) &\equiv \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} \propto V(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \propto |t|^{-\gamma} \\ \nu : \xi(T) &\propto |t|^{-\nu}\end{aligned}$$

dove $t \equiv (T - T_c)/T_c \propto (\beta - \beta_c)$ è la temperatura ridotta e $M = \sum_i s_i/V$, $\epsilon = E/V$, ($V = L^2$) sono rispettivamente la densità di magnetizzazione e di energia, C è il calore specifico e χ la suscettività magnetica. E' utile riscrivere le precedenti relazioni in termini della lunghezza di correlazione:

$$\begin{aligned}\langle |M| \rangle &\sim \xi^{-\beta/\nu} \\ \chi &\sim \xi^{\gamma/\nu} \\ C &\sim \xi^{\alpha/\nu}\end{aligned}$$

Per il modello di Ising in 2D gli esponenti critici valgono:

Esponenti critici
$\alpha = 0$
$\beta = 1/8$
$\gamma = 7/4$
$\nu = 1$

In questo caso il fatto di avere $\alpha = 0$ sembrerebbe non dare divergenze per il calore specifico, tuttavia compaiono delle correzioni logaritmiche non visibili nelle altre quantità che sono dominate da leggi a potenza.

3 Descrizione dell'algoritmo

3.a Algoritmo Metropolis

Per simulare l'evoluzione temporale del sistema verso l'equilibrio in cui le configurazioni campionate sono distribuite secondo la (2) si è usato un algoritmo Metropolis che aggiorna in modo locale la configurazione di spin secondo il seguente schema:

Si inizializza il reticolo in una configurazione disordinata

- 1) Si sceglie a caso un sito del reticolo ²
- 2) Si propone di invertire lo spin del sito scelto.
- 3) Test di accettazione: Si considera la quantità

$$r = \min \left\{ 1, \frac{P[\sigma_p]}{P[\sigma_k]} \right\}$$

²Questo è fatto usando il generatore di numeri random RAN2

se andando nella nuova configurazione l'energia è diminuita si accetta lo scambio, altrimenti se l'energia aumenta lo scambio è accettato con probabilità $e^{-\beta(E[\sigma_p]-E[\sigma_k])}$ corrispondente al rapporto di probabilità tra il caso invertito e non. In pratica nell'algoritmo si estrae un numero random tra $[0,1)$ e si confronta questo numero con il rapporto di probabilità tra le due configurazioni, se il numero estratto è minore di tale quantità si accetta lo scambio, altrimenti lo scambio è rifiutato e la configurazione rimane quella originale.

Questo viene ripetuto per un numero di volte pari a V ; questo è definito come 1 MC *step*. Vengono campionate la magnetizzazione e l'energia per diversi valori della temperatura in funzione del tempo Montecarlo.

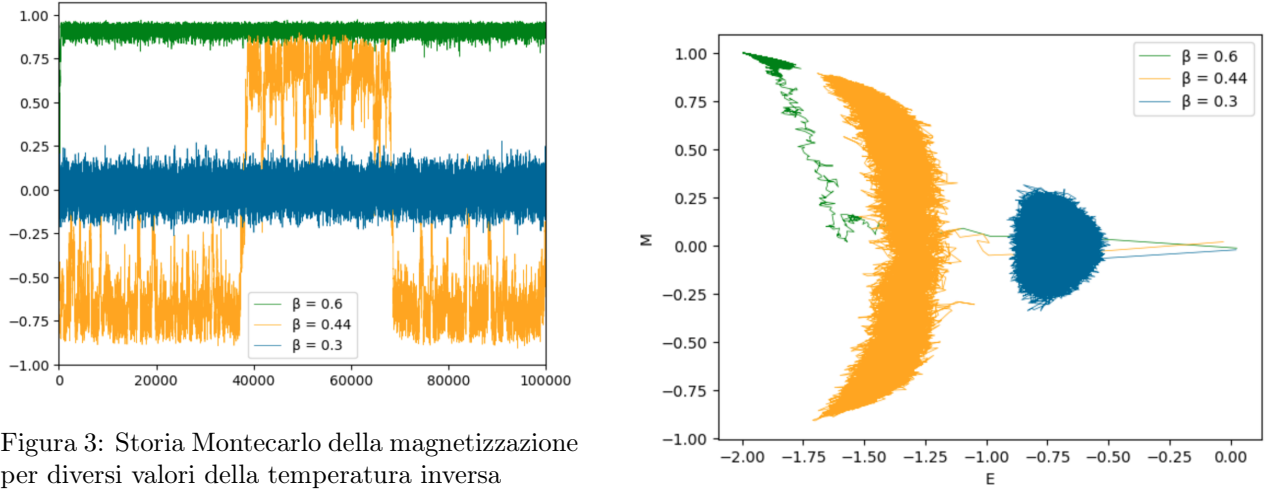
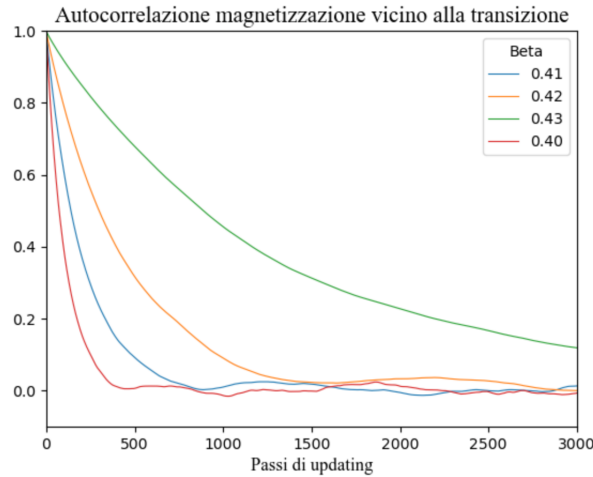


Figura 3: Storia Montecarlo della magnetizzazione per diversi valori della temperatura inversa

Si può notare come nella fase ordinata l'algoritmo Metropolis diventi non ergodico e la configurazione rimanga bloccata con tutti gli spin a $+1$. La distribuzione della magnetizzazione qui ha due picchi e un algoritmo locale non riesce a passare da un picco all'altro o alternativamente a decorrelare domini di dimensione sempre più grande che si formano intorno al punto critico. Questo fenomeno è noto come *critical slowing down*



3.b Analisi degli errori

Per considerare le correlazioni fra i dati e calcolare l'errore di combinazioni non lineari di medie termodinamiche si è usato il metodo di *resampling: binned Bootstrapt*. Il concetto alla base degli algoritmi di *resampling* è quello di usare un campione di dati distribuiti secondo la distribuzione desiderata e usarlo per produrre altri campioni *fake*³ nel modo seguente:

- Si divide il campione originale in N/k blocchi di dimensione k

³*fake* nel senso che sono ottenuti da un campione finito di dati distribuiti nel modo desiderato.

- Si costruisce un campione *fake* estraendo (con ripetizione) un blocco dal campione originale fino a che il nuovo campione ha dimensione N
- Si ripete la procedura fino a creare M campioni *fake*
- Si itera l'intera procedura aumentando k finchè l'errore non si stabilizza

Per ogni campione si calcola quindi la quantità di interesse e da questi si trova la varianza.

4 Risultati

4.a Cumulante di Binder

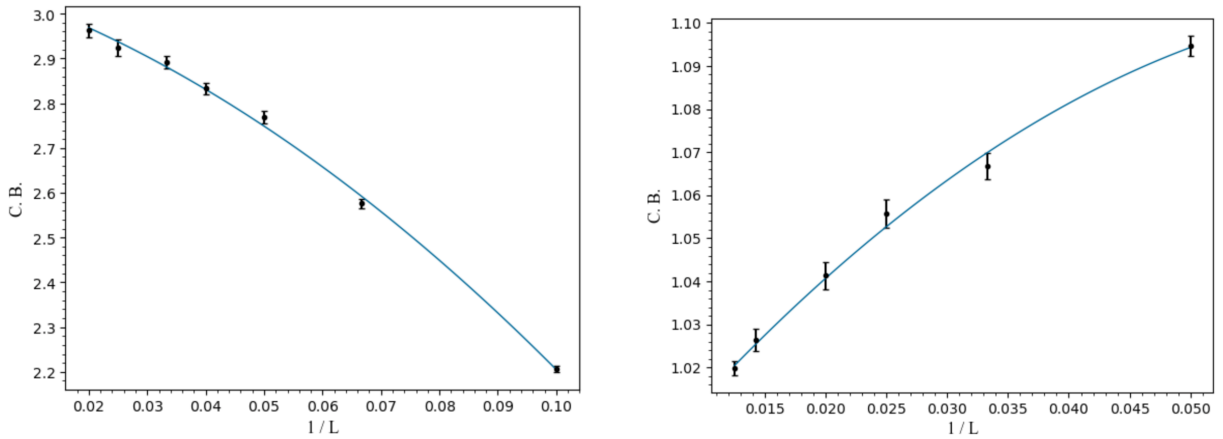
Una verifica della rottura spontanea di simmetria si può effettuare dallo studio del cumulante di Binder

$$C.B. = \frac{\langle M^4 \rangle}{(\langle M^2 \rangle)^2}$$

che vale 3 nella fase disordinata e 1 in quella ordinata, con correzioni che vanno come potenze di $1/L$.

Di seguito i valori del cumulante di Binder per due valori di β rispettivamente minore e maggiore del β_c in funzione dell'inverso del lato del reticolo. La funzione di fit è una parabola della forma:

$$f(x) = ax^2 + bx + c$$



β	0.35	0.45
a	-42 ± 9	-23 ± 7
b	-4.501 ± 1.124	3.38 ± 0.42
c	3.08 ± 0.03	0.982 ± 0.005
χ^2/dof	1.41	1.01

4.b Grandezze termodinamiche

Di seguito sono mostrati i diagrammi di fase della magnetizzazione, della suscettività magnetica e del calore specifico in un intorno del punto critico.

A volume finito non si hanno vere e proprie divergenze, tuttavia si osserva che la suscettività magnetica e il calore specifico hanno un picco che sembra crescere al crescere di L spostandosi contemporaneamente verso destra verso il "vero" valore critico termodinamico. Il massimo raggiunto dalla suscettività al variare di L sarà proporzionale $\xi_{eff}^{\gamma/\nu}$ quando ξ_{eff} assume il suo valore massimo pari a L , quindi

$$\chi_{\max} \propto L^{\gamma/\nu}$$

analogamente per il calore specifico

$$C_{\max} \propto L^{\alpha/\nu}$$

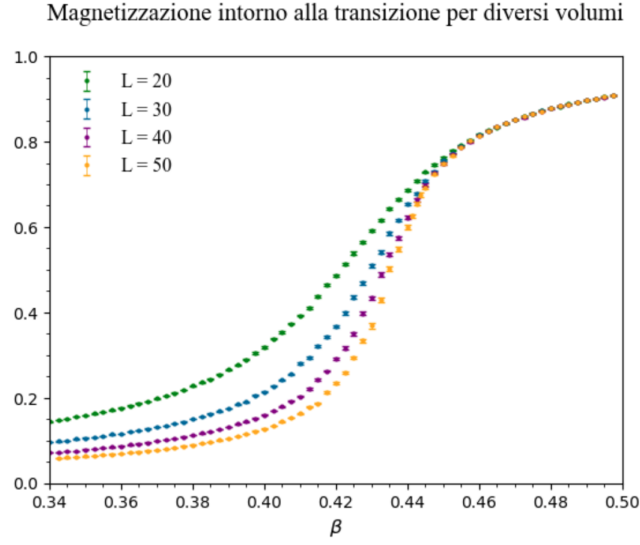
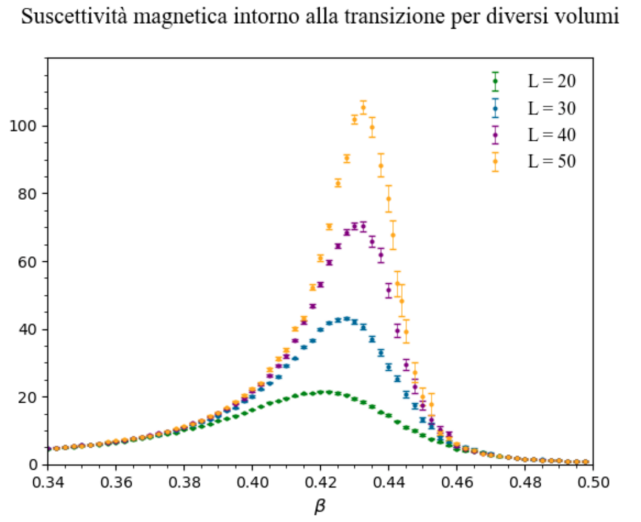
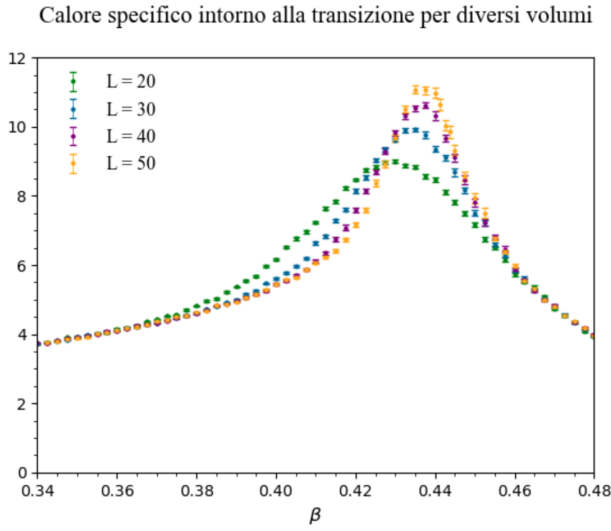


Figura 4: Si osserva una rapida salita intorno alla transizione che diventa sempre più brusca al crescere di L .



4.c Verifica esponenti critici

Per verificare gli esponenti critici γ e ν si è eseguito, per diversi valori di L , un fit dei dati della suscettività in Figura 6 vicino al massimo usando come funzione di fit

$$\chi(\beta) = \chi_{\max} + c(\beta - \beta_{\max})^2$$

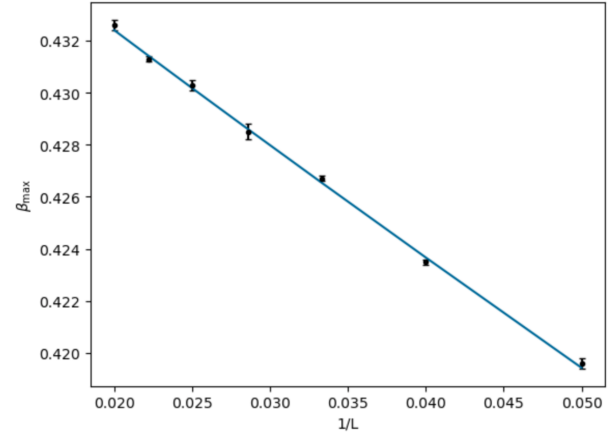
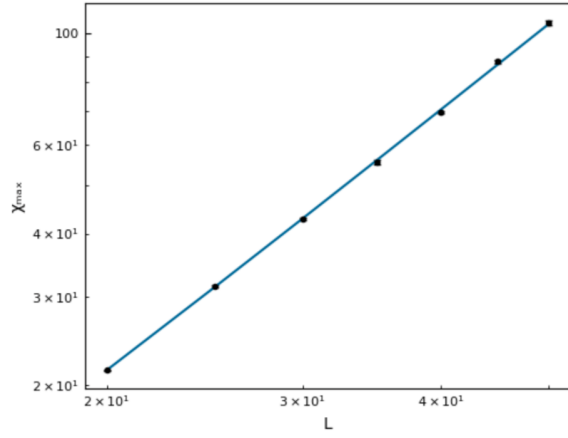
quindi dai valori di $\chi_{\max}(L)$ ottenuti si può verificare il rapporto γ/ν facendo un fit con una funzione:

$$\chi_{\max}(L) = aL^b + c$$

mentre dai valori di $\beta_{\max}(L)$ ottenuti si trova ν facendo un fit con:

$$\beta_{\max}(L) = c + aL^{-1/b_4}$$

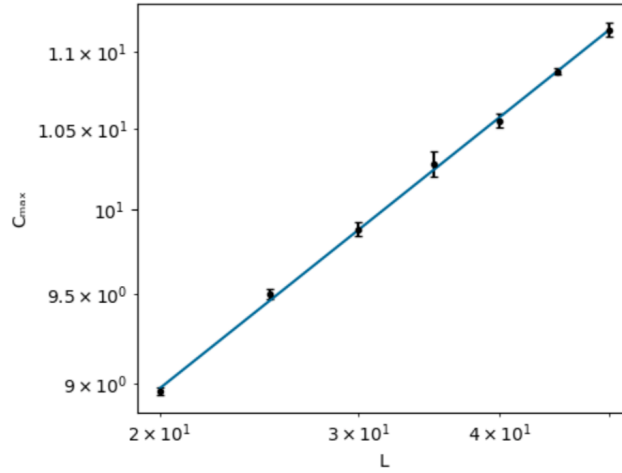
⁴Vedi F.S.S.



χ_{\max} vs L	β_{\max} vs L
$a = 0.10 \pm 0.02$	$a = -0.37 \pm 0.14$
$b = 1.77 \pm 0.05$	$b = 1.1 \pm 0.2$
$c = 1.1 \pm 0.9$	$c = 0.442 \pm 0.002$
$\chi^2/\text{dof} = 1.66$	$\chi^2/\text{dof} = 2.24$

quindi l'indice critico $\gamma = 1.9 \pm 0.4$ ⁵. Per trovare l'esponente critico α si è eseguito, come nel caso della suscettività, un fit parabolico attorno al massimo del calore specifico e poi un fit dei valori al massimo in funzione di L con:

$$C_{\max}(L) = aL^b$$



C_{\max} vs L
$a = 4.42 \pm 0.04$
$b = 0.237 \pm 0.002$
$\chi^2/\text{dof} = 0.53$

Si ottiene $\alpha = 0.26 \pm 0.05$ che non è compatibile con zero ma questo è dovuto alle correzioni logaritmiche prima accennate.

Infine per ricavare β è stato fatto un confronto dei dati della magnetizzazione per $L = 40$ con la soluzione analitica

$$f(x) = [1 - \sinh(2\beta)^{-4}]^{1/8}$$

⁵ $c = ab$, $\Delta c = a\Delta b + b\Delta a$

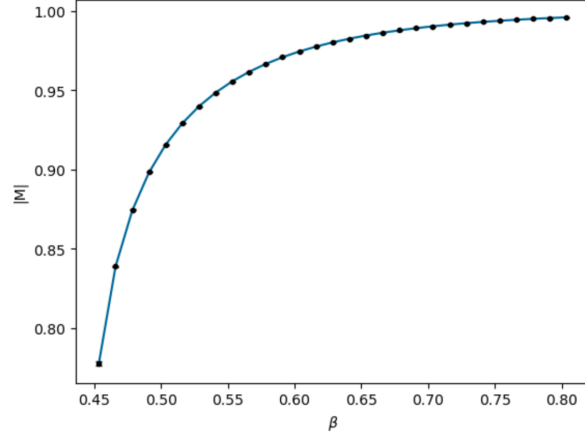


Figura 5: fit con $f(x) = [a - \sinh(2\beta)^{-4}]^b$.

$ M $ vs β
$a = 1.00004 \pm 0.00003$
$b = 0.1251 \pm 0.0001$
$\chi^2/\text{dof} = 1.3$

4.d Finite size scaling

Nel modello ci sono tre lunghezze; $\xi(\beta)$, L e la spaziatura reticolare a da cui esse dipendono implicitamente. Abbiamo quindi

$$\chi(\xi, L) = L^{\gamma/\nu} \hat{\Phi}(L, \xi)$$

dove la funzione $\hat{\Phi}$ esprime l'andamento attorno al massimo. Vicino alla transizione di fase la lunghezza di correlazione diverge e la natura microscopica del modello diventa irrilevante, sotto questa assunzione l'unica quantità rilevante diventa il rapporto L/ξ , si ottiene quindi la legge di scaling per la suscettività (e similmente per le altre grandezze termodinamiche)

$$\chi(\xi, L) = L^{\gamma/\nu} \hat{\Phi}(L/\xi) = L^{\gamma/\nu} \hat{\Phi}(L^{1/\nu} t) = L^{\gamma/\nu} \hat{\Phi}((\beta - \beta_c) L^{1/\nu}) \quad (3)$$

Il collasso dei dati ottenuti per diversi L su un'unica funzione mostra quindi che l'*ansatz* di scaling è corretto e permette di verificare gli indici critici. Inoltre è anche possibile studiare il comportamento del massimo della suscettività in funzione di L , $\beta_{max}(L)$. Il massimo si ha per un certo

$$\bar{x} = (\beta_{max}(L) - \beta_c) L^{1/\nu} \rightarrow \beta_{max}(L) = \beta_c + \bar{x} L^{-1/\nu}$$

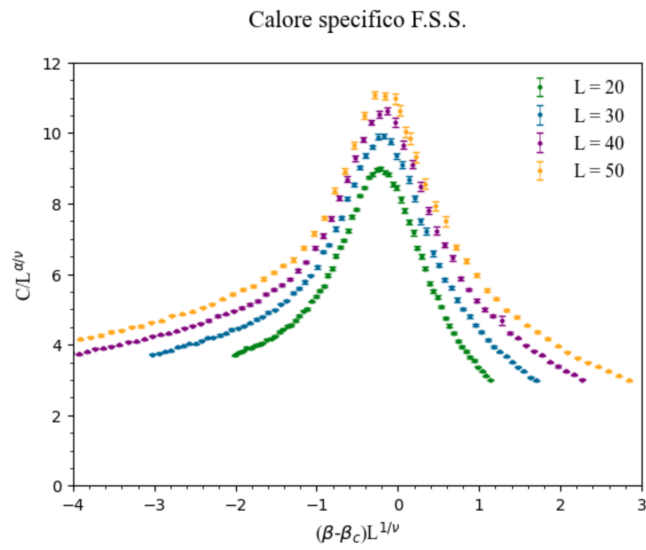
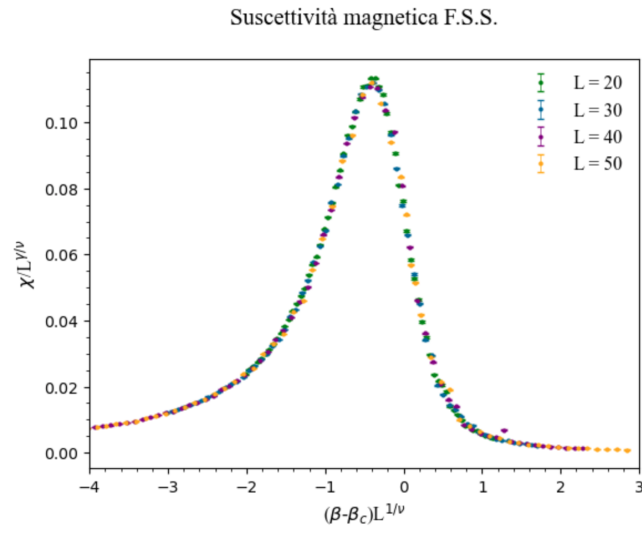
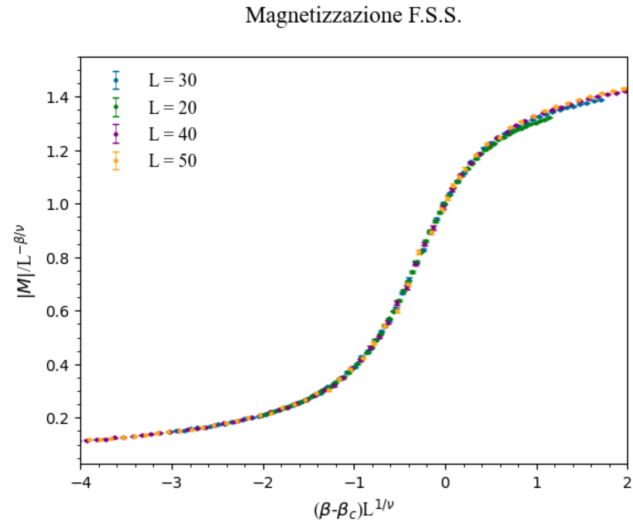


Figura 6: In questo caso i massimi non si sovrappongono a causa delle correzioni logaritmiche.