

Física Computacional: Resolución problema 1, guía 6

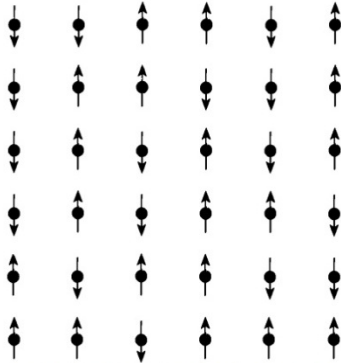
Martín Famá

Fecha de entrega: 24/09/2020

1 Resumen

Se implementó un programa en C++ para simular el Modelo de Ising, un modelo estadístico que permite investigar las características ferromagnéticas de una grilla cuyas celdas contienen espines magnéticos con dos posibles valores: *up* y *down*, -1 y 1. Se pudo analizar la evolución de la energía y la magnetización del sistema a distintas temperaturas, incluyendo realizar un diagrama de fases de la magnetización vs. la temperatura. A partir de este último resultado, se determinó la *temperatura de Curie* T_c , que indica la transición de la región ferromagnética (magnetización no nula a lo largo de la vida del sistema) a magnetización nula. Se implementó el algoritmo de Metrópolis.

2 Modelo de Ising



En la figura 1 se puede ver una grilla en donde cada celda es ocupada por un espín que puede tomar valor -1 ó 1. En el modelo de Ising, los espines interactúan con los vecinos más cercanos (es decir las 4 celdas que comparten borde), de la siguiente manera:

$$E_{i,j} = -Js_i s_j$$

en donde $E_{i,j}$ es la energía de interacción entre el espín i y el j , J es un factor de interacción, y s_i, s_j el valor de los espines. En una grilla periódica de $N \times N$, la energía total viene dada por:

$$E = -J \sum_{ij \in nn} s_i s_j - gH \sum_i s_i$$

Fig. 1: Grilla con espines cuantizados, que pueden ser *up* o *down*

en donde la primer sumatoria indica calcular las energías de interacción para todos los espines, y la segunda incluye la energía de interacción con un campo magnético externo H . En el modelo, los espines tienen la posibilidad de *flippear*, es decir cambiar su sentido, con una probabilidad que depende del cambio de energía que implicaría ese flip, y de la temperatura a la que está el sistema.

El modelo se puede simular utilizando el algoritmo de Metrópolis, que consiste en elegir aleatoriamente un spin, calcular el *factor de Boltzmann* $p = e^{-\Delta E/kT}$, en donde ΔE es el cambio de energía si se flippea el espín, obtener un número random uniforme $w \in (0, 1)$, y en el caso de que $w \leq p$, aceptar el flip y actualizar el sistema. Esto se hace iteradamente durante el tiempo que se deseé. Como se está actualizando un solo espín en cada iteración, resulta útil definir una unidad de tiempo como N^2 , siendo N el ancho y alto de la grilla. De esta manera una unidad de tiempo equivale a actualizar la cantidad de espines totales (no exactamente todos los espines uno por uno, pero si la cantidad).

En lo que sigue del trabajo, tomaremos siempre $J = 1$ y $k_B = 1$.

3 Evolución temporal de E y M

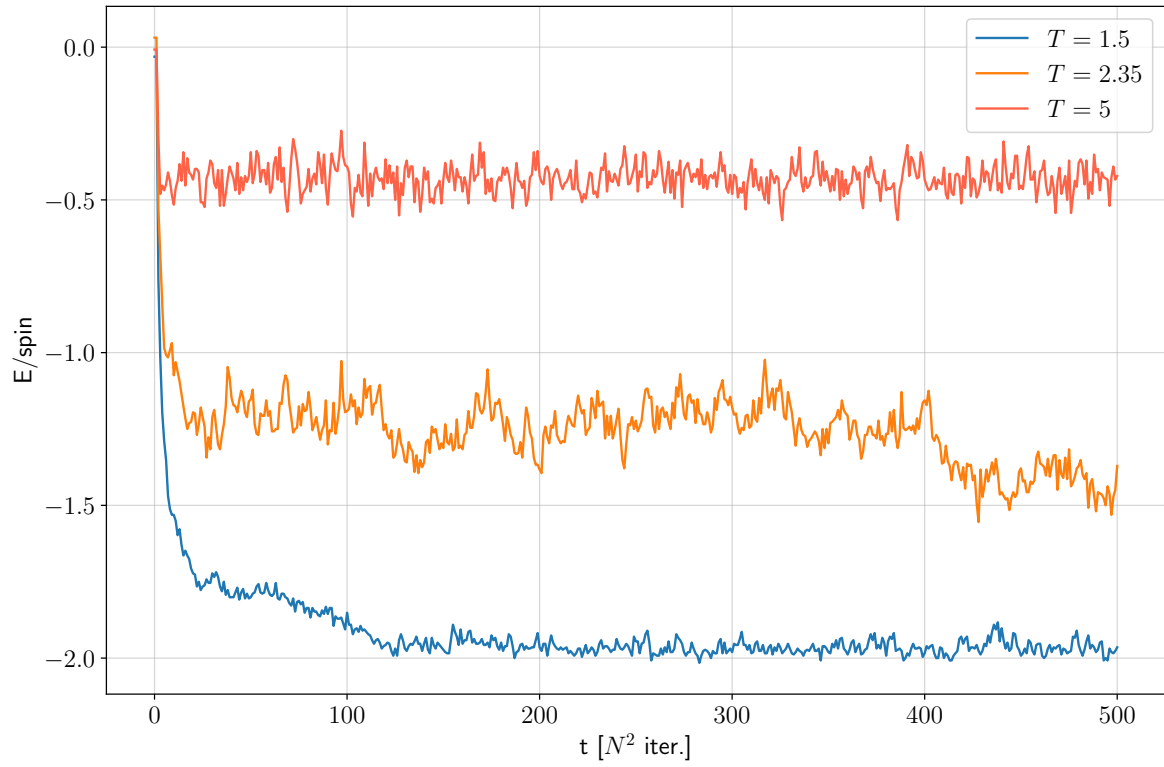


Fig. 2: Energía por espín a lo largo del tiempo para distintas temperaturas. Sistema 32×32

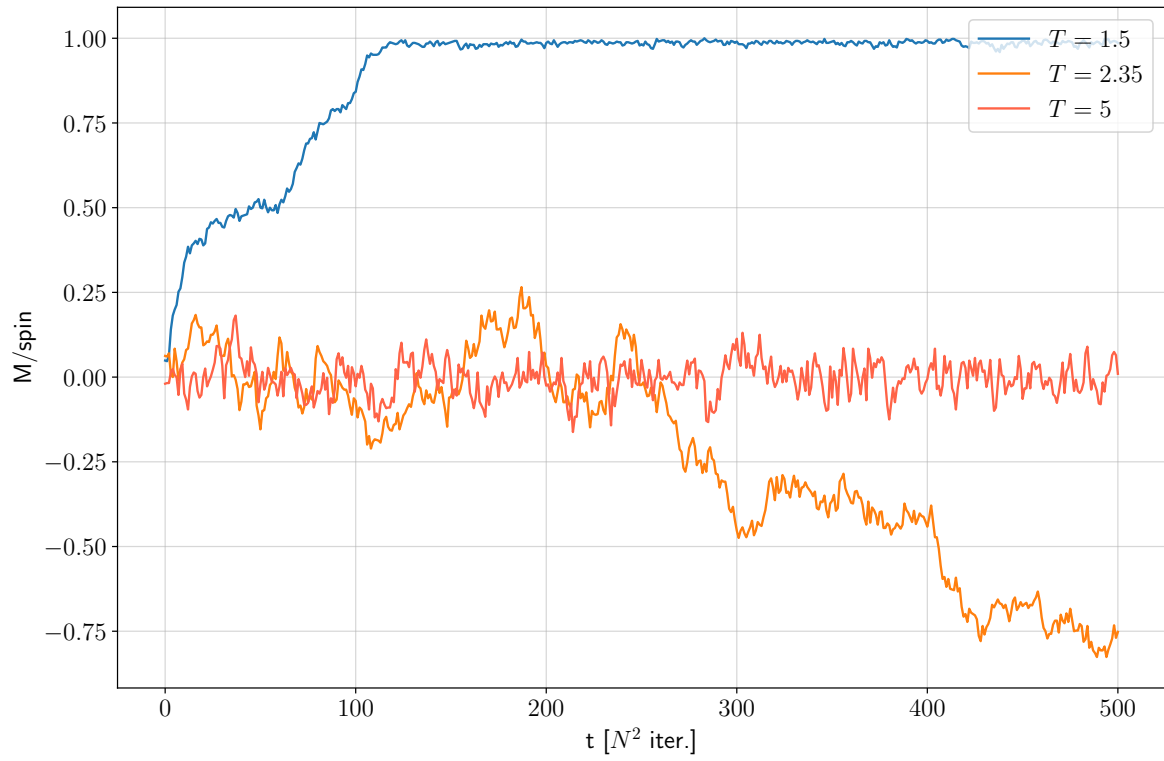


Fig. 3: Magnetización por espín a lo largo del tiempo para distintas temperaturas. Sistema 32×32

En las figuras 2 y 3 podemos ver la evolución temporal de la energía y magnetización por espín, respectivamente, para distintas temperaturas. Vemos que a una temperatura fría ($T = 1.5$), el sistema se va a un estado de energía mínima, en donde todos los espines apuntan en la misma dirección, y por ende hay magnetización máxima (en este caso, el sistema se fue hacia una magnetización positiva (todos espines *up*), pero perfectamente se pudo haber ido hacia todos los espines *down*, y la energía se hubiese minimizado igual).

Para una temperatura intermedia ($T = 2.35$), la energía evoluciona de manera más elaborada, aumentando y disminuyendo a lo largo de intervalos de tiempo considerablemente mayores a una unidad de tiempo. La magnetización acompaña, variando de manera no predecible. Esto se debe a la creación de *dominios*: regiones en la grilla donde los espines se agrupan en un sentido. Estos dominios tienen "peso" en el sentido de que pueden existir durante bastante tiempo, pero eventualmente por la naturaleza aleatoria de los flips, van transformándose y el sistema cambia por completo.

Para una temperatura alta ($T = 5$), el sistema es muy aleatorio, con lo cuál la grilla no presenta estructuras macroscópicas. Se ve a simple vista la misma cantidad de espines *up* que *down*, con lo cuál la magnetización permanece alrededor de 0. Microscópicamente, un espín en la grilla tiene mayor probabilidad de estar rodeado de espines del mismo valor que otro caso.

4 Diagrama de fases de magnetización vs. temperatura

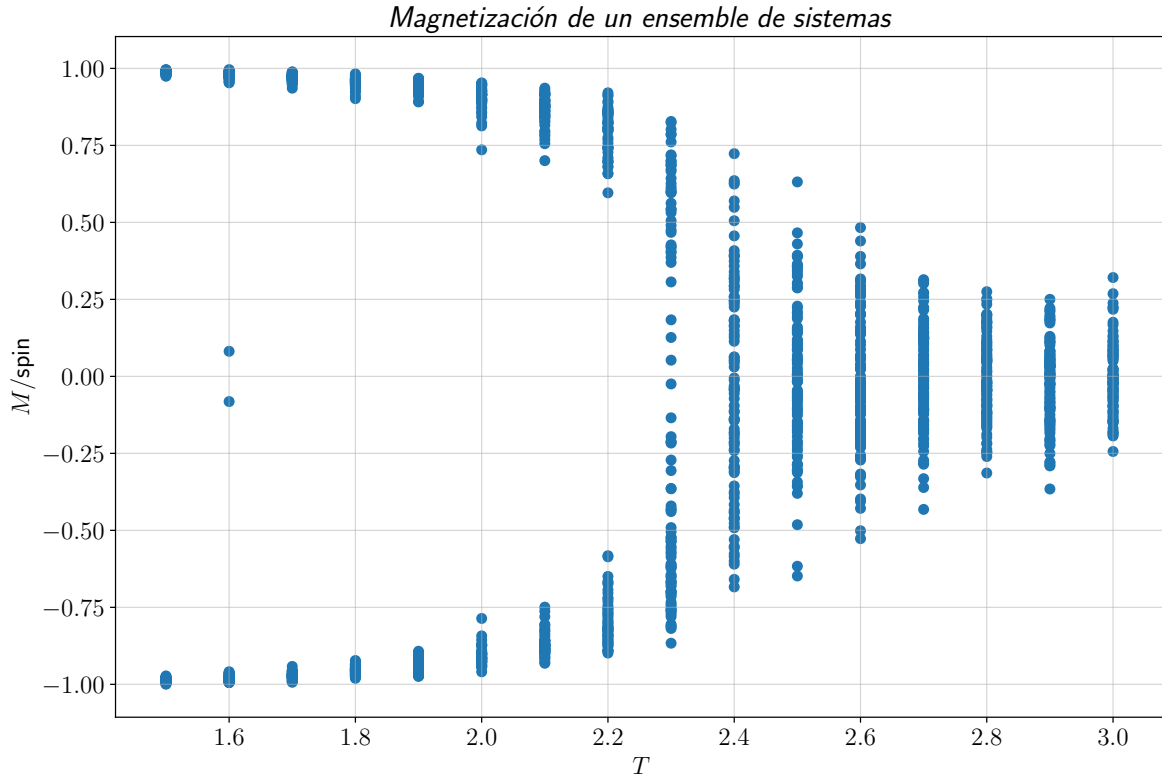


Fig. 4: Magnetización en función de la temperatura. Sistemas de 32 x 32 en régimen termalizado.

En la figura 4 se puede ver la magnetización de un ensemble de sistemas de 32 x 32 para distintas temperaturas. El proceso consistió en, para cada temperaturas, simular 100 sistemas con condiciones iniciales distintas. Se llevaron a cabo unos 1000 pasos de tiempo, para *termalizar* el sistema, y luego se tomó la magnetización de cada sistema. Esto es lo que se ve en la figura. Vemos que para temperaturas por debajo de ≈ 2.3 , los sistemas presentan comportamiento ferromagnética. Al acercarse a esta temperatura, dejan de magnetizarse, transicionando a sistemas paramagnéticos. Esta temperatura de transición se conoce como la *temperatura de Curie* T_c .

Una manera de determinar T_c a partir de estos resultados es calcular la media de M/spin ($\langle |m| \rangle$) para cada temperatura, y a partir de los datos ver en que T se tiene que $\langle |m| \rangle = 0.5$. Esto se puede ver en la figura 5.

Las barras de error vienen dadas por el σ de la magnetización de los ensembles. $\langle|m|\rangle$ y σ se calcularon, para cada T , de la siguiente manera:

$$\langle|m|\rangle = \frac{1}{100} \sum_{k=1}^{100} |m_k|$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{100} \sum_{k=1}^{100} (m_k^2 - \langle|m|\rangle^2)$$

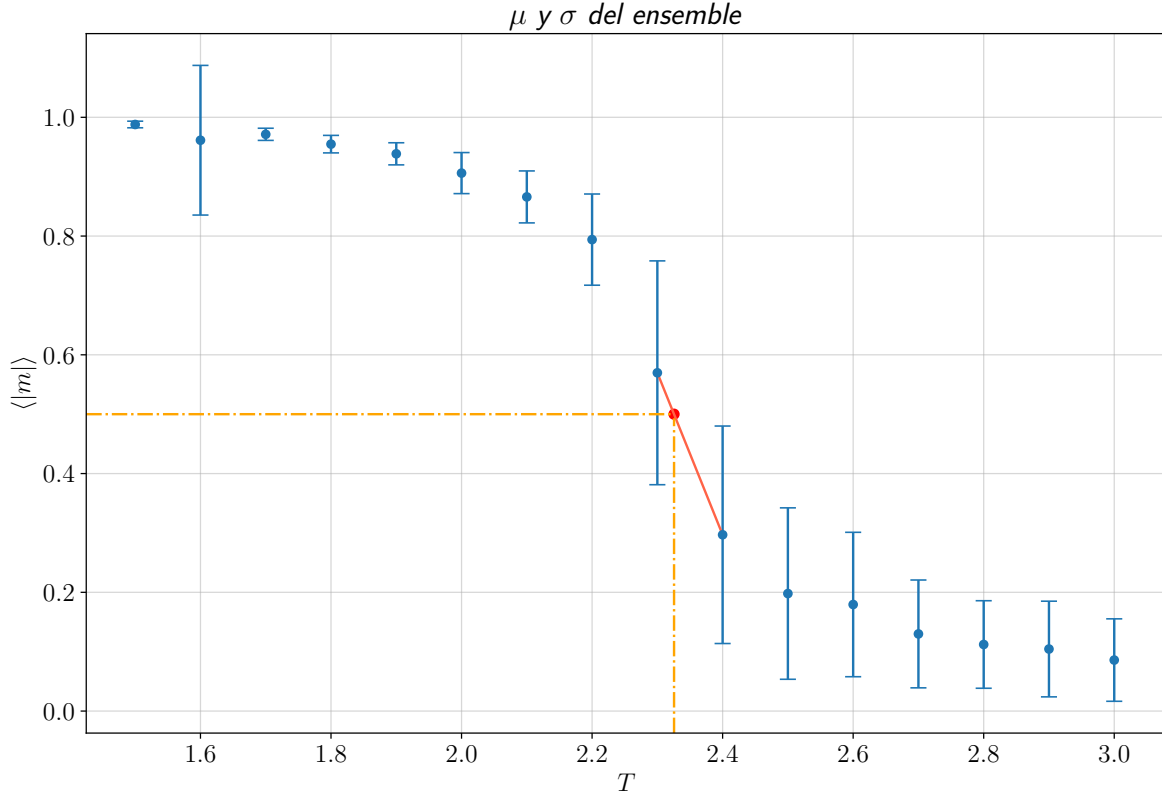


Fig. 5: $\langle|m|\rangle$ en función de T . La línea naranja horizontal marca $\langle|m|\rangle = 0.5$.

Usando este método, se obtuvo $T_c \approx 2.326$. El valor de T_c analítico que se obtiene a partir de una red cuadrada en donde $N \rightarrow \infty$ es $T_c = 2.269185\dots$. Vemos que nuestro resultado difiere en 2.5% del valor analítico.

5 Capacidad calorífica

La capacidad calorífica del sistema a distintas temperaturas se puede determinar a partir de:

$$C = \frac{1}{N^2} \frac{\sigma_E^2}{kT^2}$$

Se puede calcular σ_E para una temperatura dada haciendo que el sistema evolucione 1000 unidades de tiempo (para termalizar), y luego tomando varias miles de medidas sucesivas de E . Se llevo a cabo este procedimiento con 5000 medidas sucesivas, para sistemas de 5×5 . En la figura 6 se puede ver graficada la capacidad calorífica en función de T .

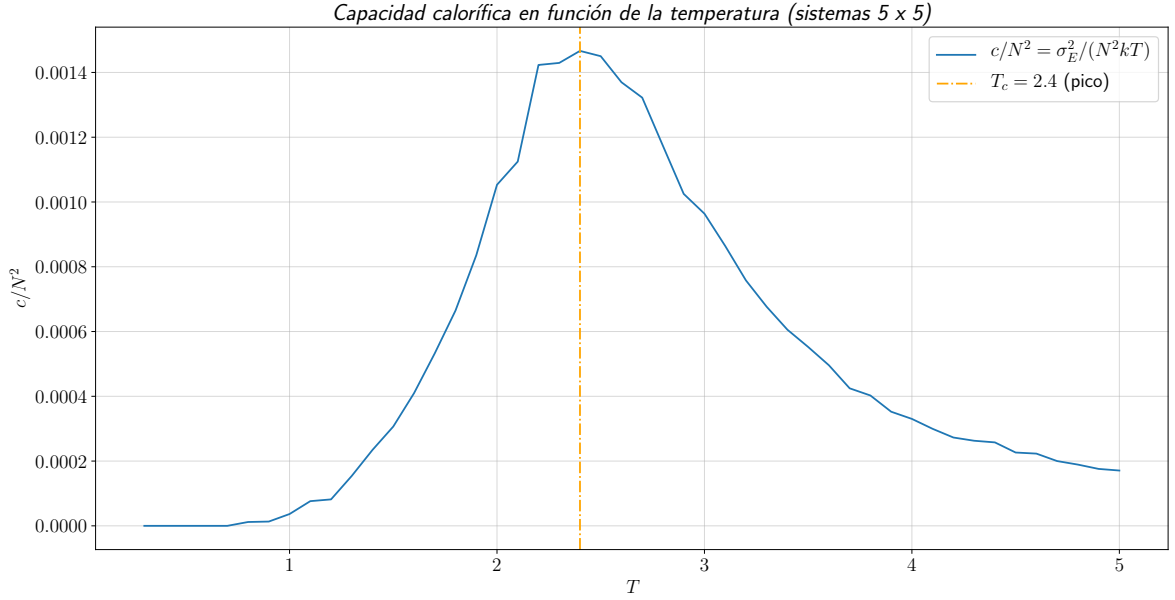


Fig. 6: Capacidad calorífica en función de T .

Además, se puede determinar T_c a partir del pico de la curva, que analíticamente es un punto en donde la capacidad calorífica diverge. En este caso, nos fijamos en el punto máximo, en cuyo caso obtenemos $T_c = 2.4$.

6 Configuraciones finales a distintas temperaturas

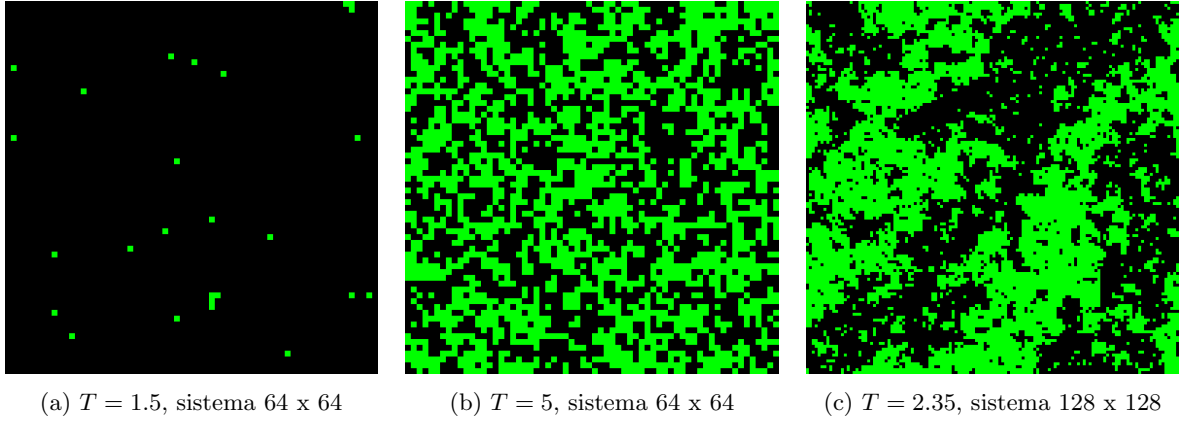


Fig. 7: Estado final de sistemas a distintas temperaturas. Se tomaron 1000 unidades de tiempo para cada sistema. Negro es *down* (-1), verde es *up* (1).

En la figura 7 se pueden ver los estados finales de sistemas a distintas temperaturas. Vemos que para $T = 1.5$, la temperatura fría, el sistema se magnetiza completamente, con (casi) todos los espines apuntando en un sentido. Los pocos que van en contra son fluctuaciones estadísticas que no logran alejar al sistema de su estado de mínima energía. Es importante notar que en este caso el sistema se fue hacia espines *down*, pero cualquiera de los dos casos es igual de probable, y depende de condiciones iniciales. En el caso de la temperatura alta, $T = 5$, el desorden gana y hay una distribución bastante uniforme de espines. Se puede ver a nivel microscópico igual que los espines tienden a estar rodeados de espines de igual signo, ya que esto disminuye la energía localmente. Finalmente, para la temperatura intermedia, $T = 2.35$, el sistema presenta dominios de magnetización. Estos dominios "compiten" por la magnetización total del sistema, y evolucionan de manera lenta (relativamente hablando, comparado con el orden de una unidad de tiempo). Esta evolución lenta explica la variación de M que vimos en la figura 3.