

Matias Pablo Borghi Orué

Departamento de Física

Facultad de Ciencias Exactas

Universidad Nacional de La Plata

Estudio de las transiciones de fase

en un modelo tipo Ising con parámetro de interacción dependiente de la orientación del espín

Contenidos

Motivación

Algoritmo

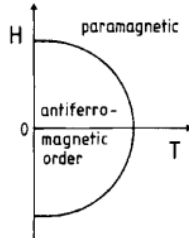
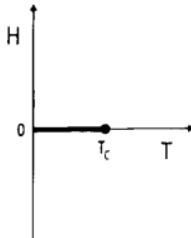
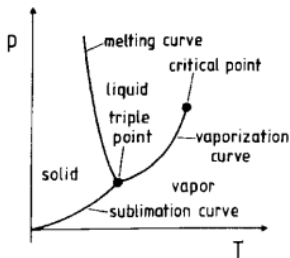
Escaleo tamaño finito

Modelo

Resultados

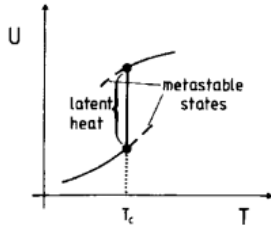
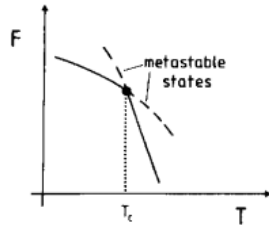
Conclusión

Transiciones de fase

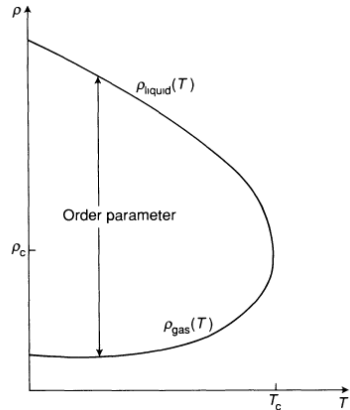


Ejemplos de diagramas de fases: **(Izquierda)** P-T del agua. **(Centro)** H-T para un ferromagneto tipo Ising. **(Derecha)** H-T para un antiferromagneto tipo Ising.

Tipos de transiciones de fase

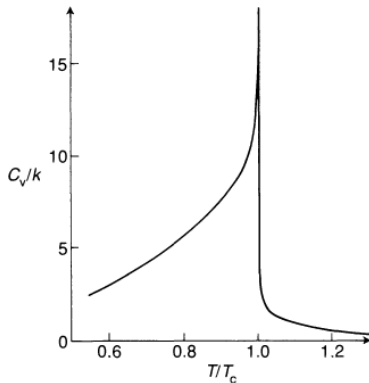
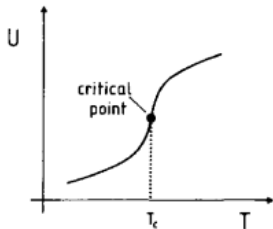
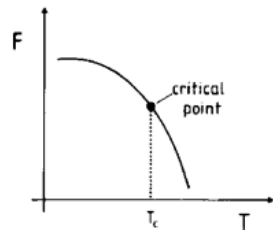


- TRANSICIONES DE PRIMER ORDEN**



Tipos de transiciones de fase

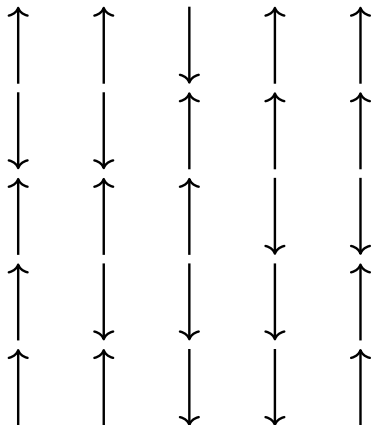
- TRANSICIONES DE SEGUNDO ORDEN O CONTINUAS**



Modelo de Ising

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

- Modelo de materiales magnéticos.
- Dimensión del problema (d): 1,2,3,...,n.
- Transición de fase para $d > 1$.
- $J > 0$: Ferromagneto,
 $J < 0$: Antiferromagneto.



Cantidades termodinámicas de interés

Magnetización media por espín

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i s_i \right\rangle. \quad (1)$$

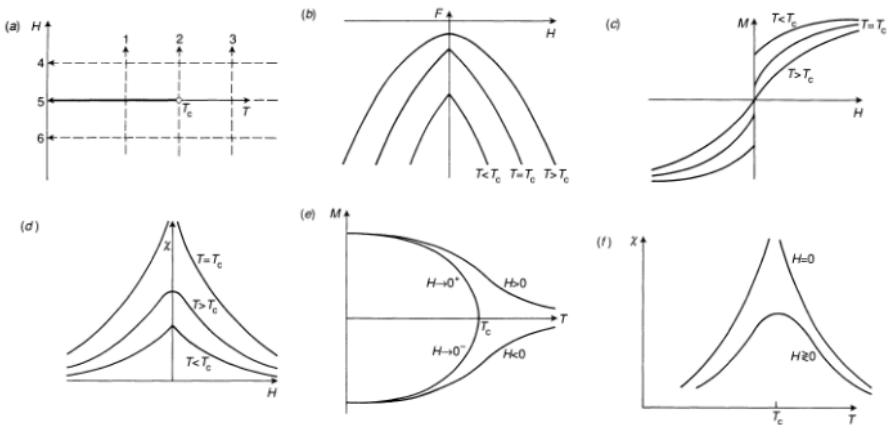
Susceptibilidad por espín

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (2)$$

Capacidad calorífica por espín

$$c_v = \frac{k\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (3)$$

Modelo de Ising



Simulaciones en equilibrio

- Estimador
- Muestreo de importancia
- Proceso de Markov
- Ergodicidad
- Balance detallado

Estimador

Valor de expectación

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}. \quad (4)$$

Estimador

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}, \quad (5)$$

Muestreo de importancia

Muestreo de importancia

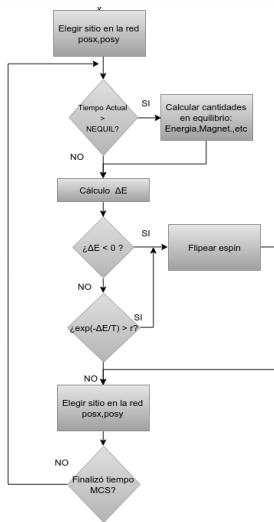
$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} \quad (6)$$

Proceso de Markov

- Ergodicidad
- Balance detallado: $p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu)$

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (7)$$

Algoritmo de Metrópolis

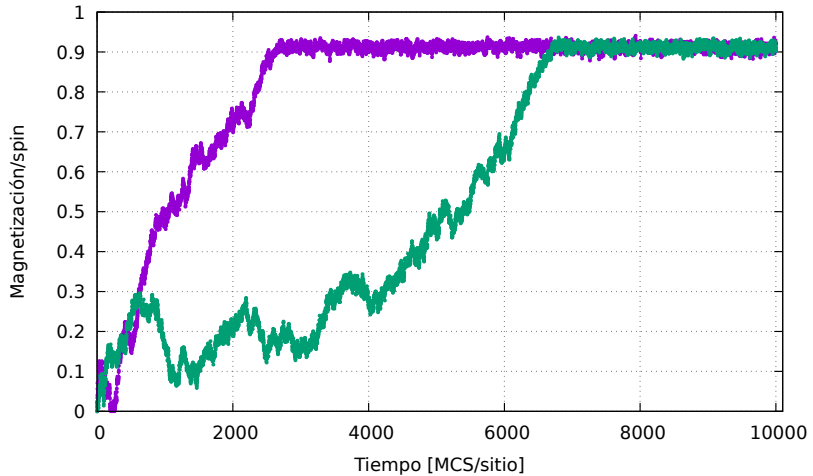


$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu).$$

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}.$$

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)} & , \text{ si } E_\mu - E_\nu > 0 \\ 1 & , \text{ caso contrario.} \end{cases}$$

Equilibrio



Fluctuaciones críticas y enlentecimiento crítico

Error estadístico

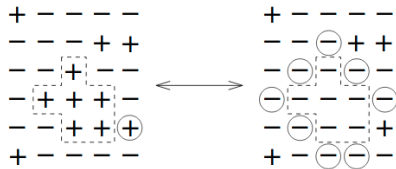
$$\sigma \propto \sqrt{\frac{1}{n}} \quad (8)$$

Tiempo de correlación

$$\tau \sim \xi^z \sim L^z, \quad (9)$$

| dimensión d | Algoritmos | | |
|-------------|------------|---------|---------------|
| | Metropolis | Wolff | Swendsen-Wang |
| 2 | 2.167(1) | 0.25(1) | 0.25(1) |

→ Algoritmo de Wolff?

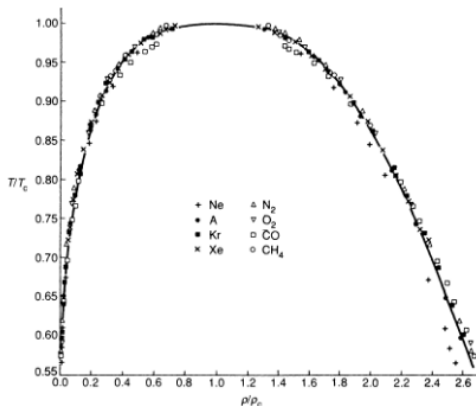


Comportamiento crítico y exponentes críticos

| Calor específico | | $C_H \sim t ^{-\alpha}$ | | |
|-------------------------|--------------|---------------------------|------------|------------|
| Magnetización | | $M \sim t ^\beta$ | | |
| Susceptibilidad | | $\chi \sim t ^{-\gamma}$ | | |
| Longitud de correlación | | $\xi \sim t ^{-\nu}$ | | |
| | | Modelo | | |
| | | 2D Ising | (exacto) | 3D Ising |
| Exponente | $2\beta/\nu$ | 0.252(2) | 1/4 | 0.517(2) |
| | β | 0.124(5) | 1/8 | 0.3273(17) |
| | $1/\nu$ | 1.02(4) | 1 | 0.6327(20) |
| | z | 2.166(7) | 2.1667(5)* | 2.042(6) |
| | θ | 0.191(1) | - | 0.108(2) |

Universalidad

- Rango de interacción: primeros vecinos, segundos vecinos, etc.
- Dimensionalidad del espacio, d : 1,2,3,...
- Simetría del parámetro de orden: escalar, vectorial, etc.



Escaleo de tamaño finito

Resultados en tamaño finito \longrightarrow Resultados límite termodinámico**Límite termodinámico**

$$\xi = |t|^{-\nu}, \quad (10a)$$

$$\chi = |t|^{-\gamma}, \quad (10b)$$

donde $t = (T - T_c)/T_c$ es una **variable de escala**.

$$\rightarrow \chi \sim \xi^{\gamma/\nu}.$$

Tamaño finito

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (11)$$

- $\chi_0(x) = \text{constante}$ si $x \gg 1$,
- $\chi_0(x) \sim x^{\gamma/\nu}$ si $x \rightarrow 0$,

Escaleo de tamaño finito

$$L^{-\gamma/\nu} \chi_L = \tilde{\chi}(L^{1/\nu} t), \quad (12)$$

$$L^{-\alpha/\nu} c_L = \tilde{c}(L^{1/\nu} t), \quad (13)$$

$$L^{\beta/\nu} m_L = \tilde{m}(L^{1/\nu} t), \quad (14)$$

$$U_{4_L} = \tilde{U}_4(L^{1/\nu} t). \quad (15)$$

Escaleo de tamaño finito extendido

Límite termodinámico

$$\xi = \frac{\tanh^{1/2}(\beta)}{1 - \tanh(\beta)} = \tanh^{1/2}(\beta) \tau^{-\nu}, \quad (16a)$$

$$\chi = \frac{2}{1 - \tanh(\beta)} - 1 = 2\tau^{-\gamma} - 1, \quad (16b)$$

donde $\tau = 1 - \tanh(\beta)$ es una **variable de escala**.

Tamaño finito

$$\frac{\chi(\beta) + 1}{2L / \tanh^{1/2}(\beta)} = \tilde{\chi} \left(\frac{L[1 - \tanh \beta]}{\tanh^{1/2}(\beta)} \right). \quad (17)$$

¿Cómo calcular la temperatura crítica?

Cumulante cuarto

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}. \quad (18)$$

- $T < T_c$: $U_4 \rightarrow 2/3$
- $T > T_c$: $U_4 \rightarrow 0$
- $T = T_c$: $U_4 = U_0^*$

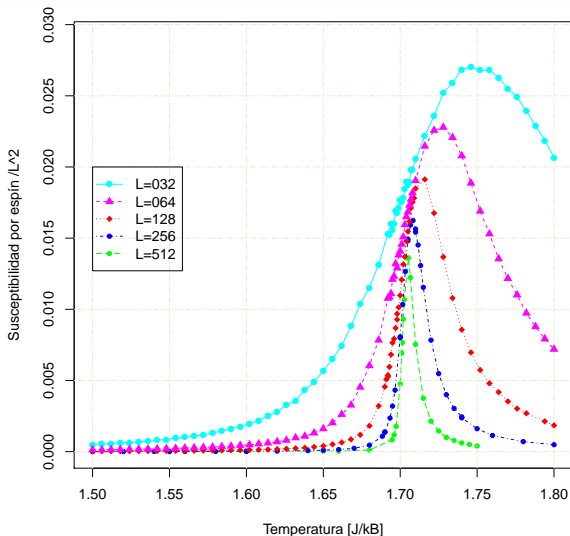
Modelo propuesto

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i \cdot s_j, \quad (19)$$

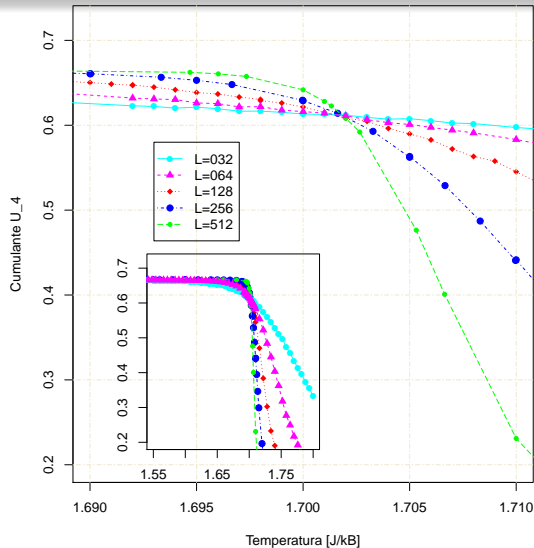
donde

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} \alpha_{\uparrow\downarrow}, & \text{si } s_i \neq s_j \\ 1, & \text{caso contrario.} \end{cases}$$

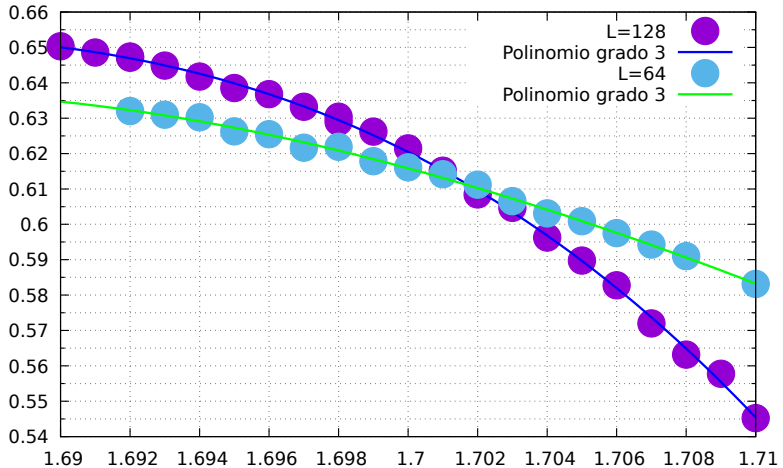
Cálculo de la temperatura crítica para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0.5$



Cálculo de la temperatura crítica para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0.5$



Cálculo de la temperatura crítica para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0.5$



Cálculo de la temperatura crítica para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 0.5$

$$T_c(L) = T_c + AL^{-1/\nu}$$

$$T_c = 1.701(1)$$

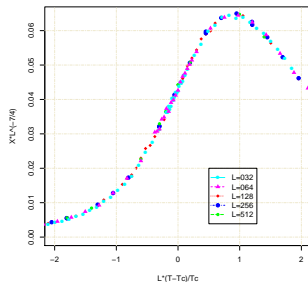
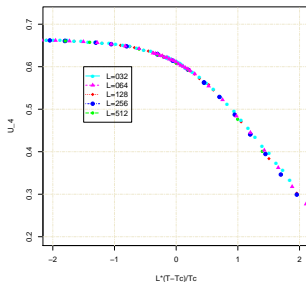
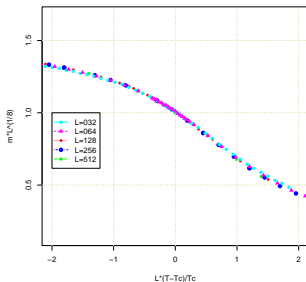
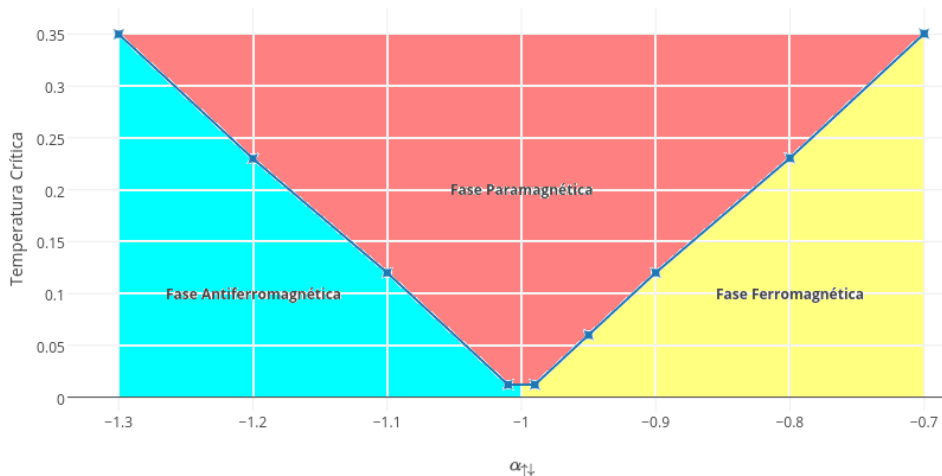
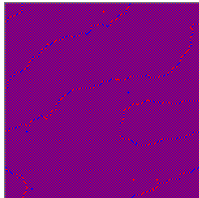


Diagrama de fases

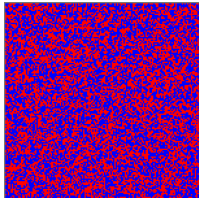


Instantáneas T=1.0

$$\alpha_{\uparrow\downarrow} = -3$$



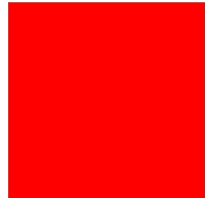
$$\alpha_{\uparrow\downarrow} = -0.8$$



$$\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$$

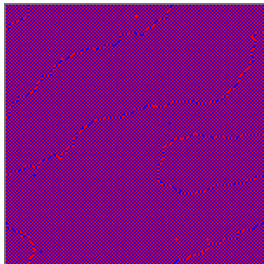


$$\alpha_{\uparrow\downarrow} = 10$$

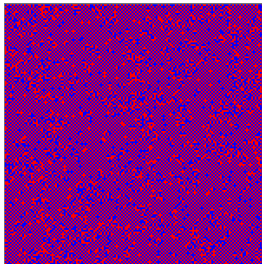


Instantáneas $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -3$

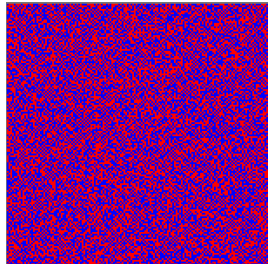
T=1.0



T=2.269



T=4.0

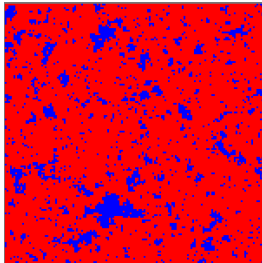


Instantáneas $\alpha_{\uparrow\downarrow} = 1$

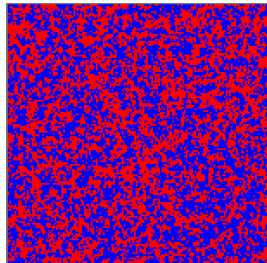
T=1.0



T=2.269



T=4.0



¿Qué sucede con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$?

- 1 Cálculo susceptibilidad con campo magnético externo aplicado en el límite $H \rightarrow 0$.
- 2 Obtención exponentes críticos en el régimen de la dinámica crítica a tiempos cortos.
- 3 Resultado analítico.
- 4 Comparación del resultado analítico con los resultados de la simulación y el modelo de Ising en 1D.

Desarrollo analítico del modelo

3 Resultado analítico.

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} \alpha_{\uparrow\downarrow} = -1 & , \text{ si } s_i \neq s_j \\ 1 & , \text{ caso contrario} \end{cases}$$

entonces

$$\alpha_{ij}s_is_j = \begin{cases} (-1) * (-1) = +1 & , \text{ si } s_i \neq s_j \\ (+1) * (+1) = +1 & , \text{ caso contrario.} \end{cases}$$

Cálculo función de partición

$$\mathcal{H}_N = - \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i.$$

¡Paramagneto!

$$\mathcal{H}_N = \mathfrak{C} - H \sum_{i=1}^N s_i.$$

$$Z_N(\beta) = \sum_{\substack{\text{Todas las} \\ \text{configuraciones} \\ \text{posibles del sistema}}} \exp(-\beta \mathcal{H}_N^{2D}) = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \exp\left(\beta \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} s_i s_j\right).$$

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \left[\prod_{\langle ij \rangle} \exp(\beta \alpha_{ij} s_i s_j) \right].$$

Cálculo función de partición

$$Z_N^{2D}(\beta) = (\exp \beta)^{2N}.$$

$$\begin{aligned} Z_N^{2D}(\beta, H) &= (\exp \beta)^{2N} (2 \cosh \beta H)^N = \\ &= (2 \exp(2\beta) \cosh \beta H)^N. \end{aligned}$$

Cantidades termodinamicas

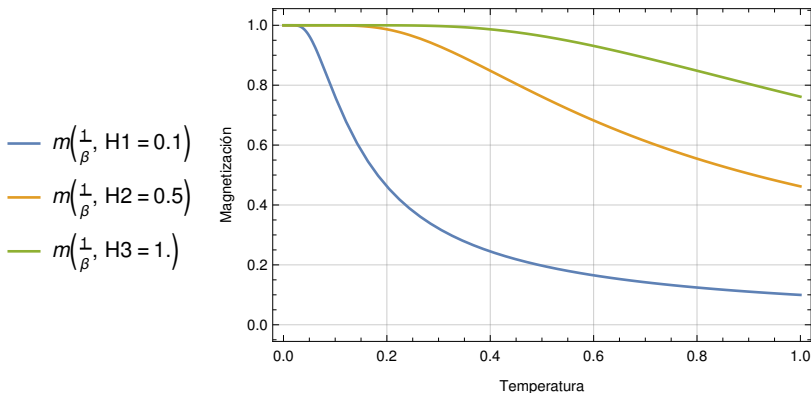
$$F_N(T, H) = -NkT \log 2 - NkT \log (\exp(2/kT) \cosh(H/kT))$$

$$E = -\frac{1}{N} \frac{\partial \log Z_N}{\partial \beta} = -(2 + H \tanh(\beta H))$$

$$C_V = -k\beta^2 \left(\frac{\partial E}{\partial \beta} \right) = k(\beta H)^2 \operatorname{sech}^2(\beta H)$$

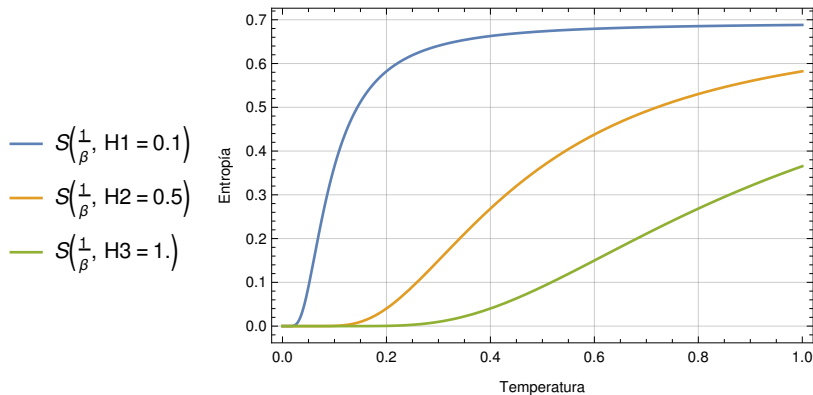
Magnetización

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = \tanh(\beta H) \quad \chi = \frac{\partial m}{\partial H} = \beta \operatorname{sech}^2(\beta H)$$



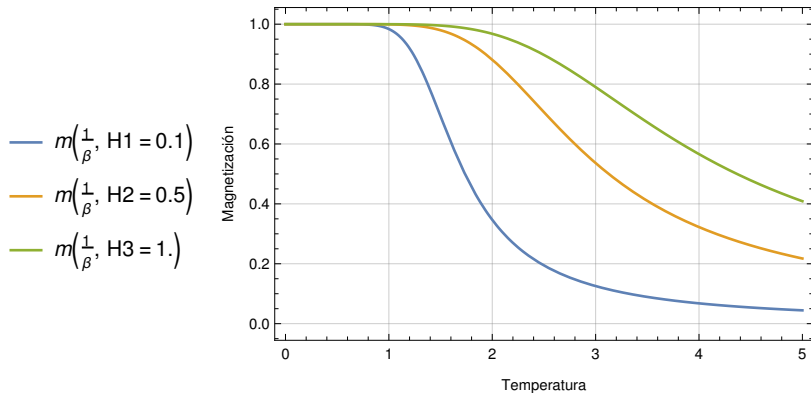
Entropía

$$S = Nk [\log (2 \cosh \beta H) - \beta H \tanh \beta H]$$

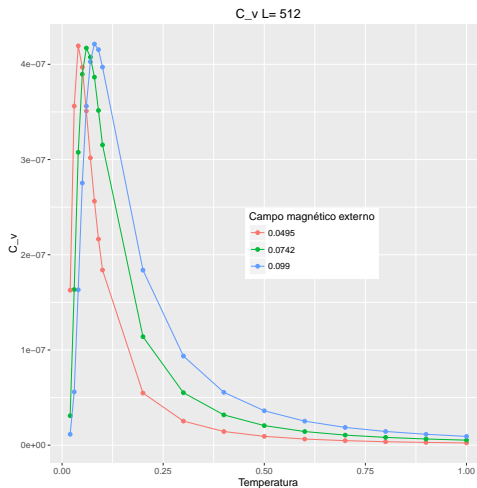
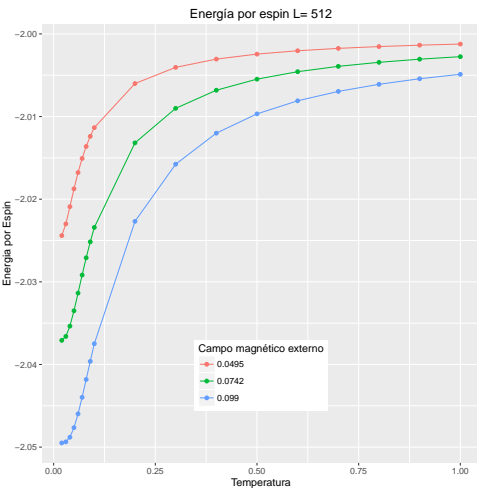


Comparando con Ising 1D

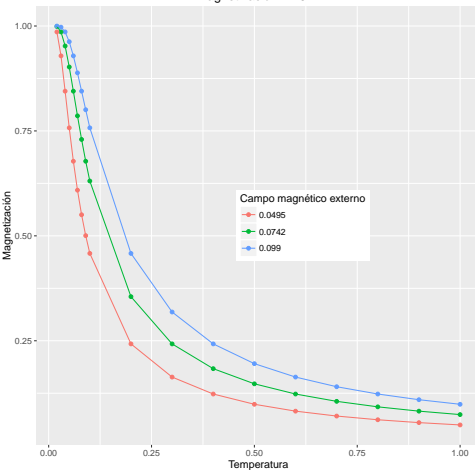
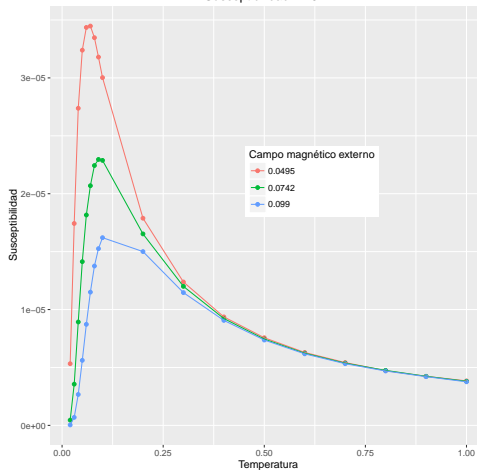
$$m(T, H) = \frac{\sinh(\beta H)}{(\exp(-4\beta J) + \sinh^2(\beta H))^{1/2}},$$



Resultados campo magnetico externo pequeño

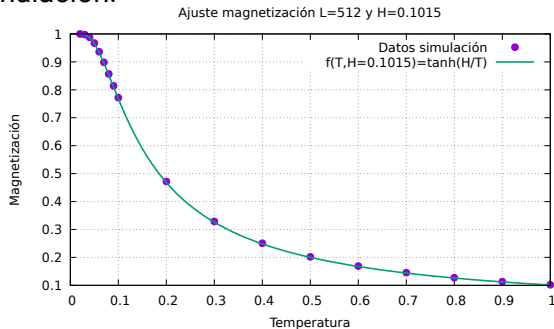


Resultados campo magnetico externo pequeño

Magnetización $L=512$ Susceptibilidad $L=512$ 

Comparando resultados analíticos y simulaciones

4 Comparación del resultado analítico con los resultados de la simulación.



El sistema **NO ordena** para $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$ a temperatura cero.

Conclusión

- $\alpha_{\uparrow\downarrow} \neq -1$: Determinación de la temperatura crítica. Transiciones de fase continuas. Misma clase de universalidad que Ising 2D.
- $\alpha_{\uparrow\downarrow} = -1$: El sistema no ordena a temperatura nula.
- Obtención del diagrama de fases.

Para continuar desarrollando

- Desarrollo analítico con $\alpha_{\uparrow\downarrow} = f(\epsilon)$
- Interacciones a segundos vecinos, etc.

¡Muchas gracias!