

Esame di fisica computazionale

Modello XY classico

Francesco Musso

Settembre 2020

1 Introduzione

Studio con simulazioni di tipo Monte Carlo del modello classico XY su un lattice tridimensionale cubico. Grazie all'algoritmo di Metropolis si stimano l'energia interna e la magnetizzazione dei sistemi a diverse temperature. Si osserva un comportamento in accordo con le considerazioni teoriche della meccanica statistica.

2 Descrizione fisica del problema

Dato un lattice 3-dimensionale Λ per ogni sito $j \in \Lambda$ è presente un vettore a norma unitaria \mathbf{s}_j definito dal parametro $\phi_j \in (-\pi, \pi]$ tale che $\mathbf{s}_j = (\cos \phi_j, \sin \phi_j)$.

Immaginando il lattice Λ come composto da atomi il cui spin sia descritto dal vettore \mathbf{s}_j e non considerando le energie cinetiche degli atomi, il sistema sarà descritto dall'Hamiltoniana

$$H(\mathbf{s}) = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \sum_j \mathbf{h} \cdot \mathbf{s}_j = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \cos(\phi_i - \phi_j) - \sum_j h \cos \phi_j \quad (1)$$

dove \mathbf{s} rappresenta la configurazione totale degli spin $\mathbf{s} = \{\mathbf{s}_j\}$ con $\mathbf{s}_j \in \Lambda$, mentre J_{ij} rappresenta l'interazione di accoppiamento tra gli spin e \mathbf{h} è un campo magnetico esterno scelto per semplicità uniforme su tutto il lattice.

L'approssimazione riguardante l'energie cinetiche degli atomi appare ragionevole nel caso di un solido, per esempio formato da un reticolo cristallino, in cui gli atomi che lo compongono sono in prima approssimazione fermi.

Si introduce un'ulteriore semplificazione utilizzando un modello in cui l'interazione di accoppiamento tra gli spin è di corto raggio:

$$J_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } ij \text{ sono vicini} \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (2)$$

Scegliendo $J_{ij} > 0$ l'interazione è detta *ferromagnetica* in quanto dal punto di vista macroscopico produrrà un comportamento ferromagnetico, cioè una magnetizzazione residua anche in assenza del campo esterno \mathbf{h} .

L'effetto dell'interazione tra gli spin è quello di allineare gli stessi in un'unica direzione e quello del campo magnetico esterno è quello di allinearli nella direzione del campo. L'agitazione termica sfavorisce entrambi questi comportamenti tendendo a disordinare la configurazione.

Il problema viene affrontato con l'utilizzo del formalismo dell'*ensemble canonico* e la funzione che descrive le probabilità delle varie configurazioni \mathbf{s} è data da

$$P(\mathbf{s}) = \frac{\exp(-\beta H(\mathbf{s}))}{\sum_{\mathbf{s}} \exp(-\beta H(\mathbf{s}))} \quad (3)$$

Le osservabili studiate sono l'energia interna U che è uguale ad H e la magnetizzazione M che è uguale a

$$\frac{\langle M \rangle}{N} = \frac{1}{N} \left| \left\langle \left(\sum_j \cos(\phi_j), \sum_j \sin(\phi_j) \right) \right\rangle \right| \quad (4)$$

dove la media in questo indica la media sull'ensemble.

3 Algoritmo utilizzato

Per ottenere le medie sull'ensemble si utilizza una simulazione Monte Carlo e in particolare l'algoritmo di Metropolis-Hastings. Prendendo un lattice cubico di $N = 512$ siti ad ogni passo Monte Carlo l'angolo assegnato ad ogni spin viene cambiato di una quantità casuale creando una proposta per una nuova configurazione su cui, se accettata, calcolare i valori dell'osservabili desiderate. In caso contrario i valori delle osservabili vengono calcolati sulla configurazione iniziale. La proposta viene creata nel seguente modo

$$\phi_j^{mc} = \phi_j + \Delta(\eta - 0.5) \quad (5)$$

dove η è un numero casuale compreso tra 0 e 1 con distribuzione di probabilità uniforme, mentre Δ è un parametro che determina l'ordine di grandezza della differenza di ϕ tra la proposta e la configurazione.

La proposta viene accettata se

$$A \equiv \exp(-\beta (H(\mathbf{s}^{mc}) - H(\mathbf{s}))) > \xi \quad (6)$$

dove ξ è un nuovamente un numero casuale compreso tra 0 e 1 con distribuzione di probabilità uniforme.

Il teorema del limite centrale, che sta alla base di una simulazione Monte Carlo, richiede che le variabili aleatorie considerate siano indipendenti, condizione che, da come si può facilmente dedurre, in questo caso non può essere

soddisfatta. Dunque bisogna cercare di minimizzare la correlazione tra una configurazione e quelle successive e allo stesso tempo tenere conto di questa correlazione nella stima dell'incertezza dei valori delle osservabili.

Più Δ è piccolo e più saranno i passi accettati in proporzione a quelli proposti, ma allo stesso modo la correlazione tra un passo e l'altro sarà molto alta dato che le configurazioni così ottenute saranno molto simili a quelle da cui derivano; al contrario, nel caso in cui Δ risulti essere troppo piccolo pochi passi saranno accettati e nuovamente la correlazione tra un passo e il successivo sarà alta in quanto molto spesso i due passi coincideranno. Per ovviare a questo problema è stato implementato un algoritmo che, in una fase iniziale di equilibratura, modifica il Δ in modo che il rapporto tra i passi accettati e quelli rifiutati si trovi in un range compreso tra il 35% e il 65%.

Per quanto riguarda la stima dell'errore, definita la variabile aleatoria S_L come

$$S_L = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L f(x_i) \quad (7)$$

dove in questo caso f è l'osservabile e gli x_i è la configurazione ottenuta allo step i e

$$\langle S_L \rangle = \langle f \rangle \quad (8)$$

$$\langle S_L^2 \rangle = \frac{1}{L} \sum_{l=0}^L \langle f(x_{i+l}) f(x_i) \rangle \quad (9)$$

L'incertezza su $\langle f \rangle$ sarà quindi data da $\sqrt{\langle S_L^2 \rangle - \langle f \rangle^2}$. L in questo caso rappresenta la "distanza" massima tra le configurazioni su cui viene calcolata la correlazione.

4 Risultati

I sistemi considerati sono 3 e ciò che li contraddistingue è il rapporto tra il modulo del campo \mathbf{h} e J . Le osservabili vengono studiati al variare del rapporto tra $B T/J$. Per tutti i sistemi sono stati eseguiti 256mila passi Monte Carlo, di cui 32mila iniziali di equilibratura.

Il primo sistema studiato è quello in assenza di campo magnetico esterno e i risultati ottenuti per l'energia interna per spin e per la magnetizzazione per spin sono riportati nelle seguenti figure.

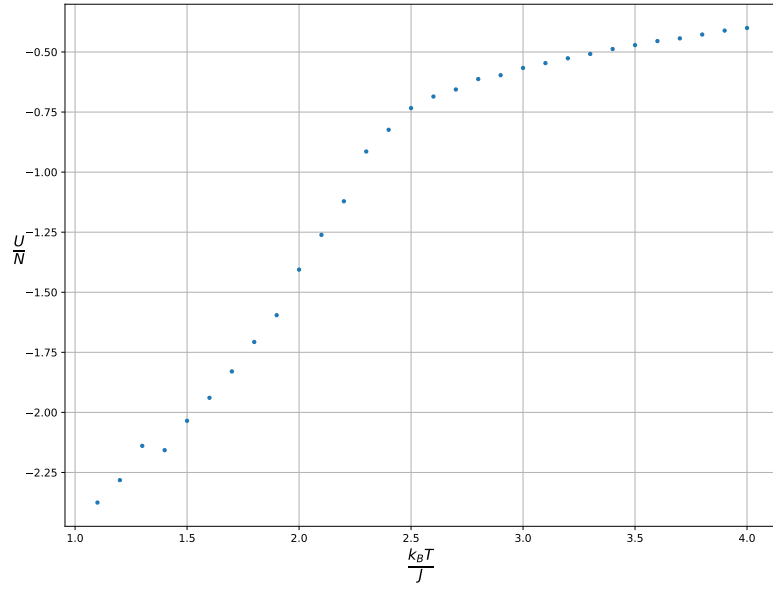


Figura 1: U/N in funzione di T con $h = 0$

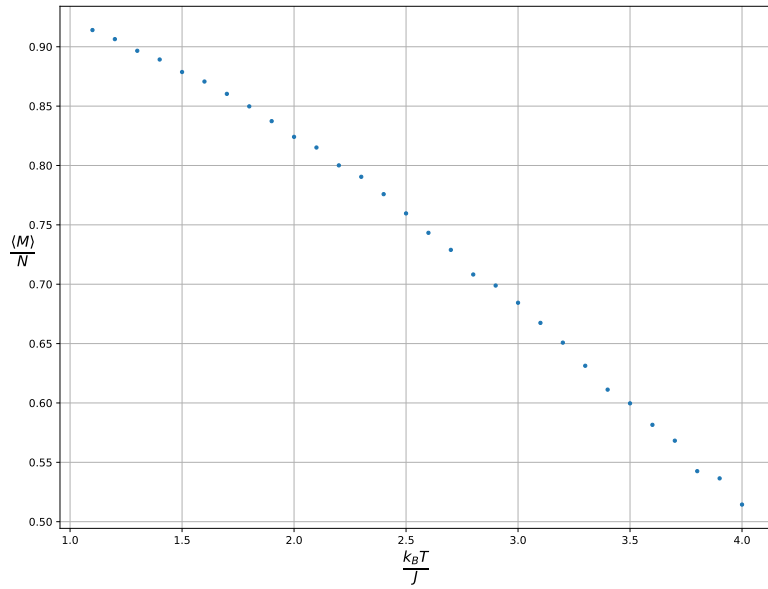


Figura 2: M/N in funzione di T con $h = 0$

Come si può osservare da Figura 1 intorno a $k_B T/J \simeq 2$ l'energia ha un flesso e ciò significa che in quella regione di temperatura avviene una transizione di fase. Dal grafico della magnetizzazione si può osservare invece che per temperature minori di quella della transizione di fase la magnetizzazione diminuisce all'aumentare della temperatura, come ci si aspettava. Una volta avvenuta la transizione di fase la magnetizzazione diminuisce molto più rapidamente con l'aumentare della temperatura e tende rapidamente a 0.

Di seguito sono invece riportati i grafici delle osservabili quando è presente un campo magnetico esterno.

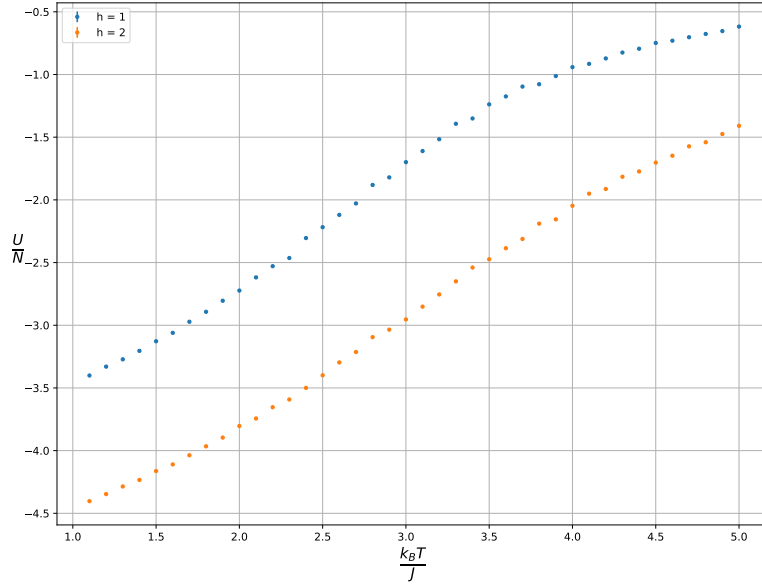


Figura 3: U/N in funzione di T con campo magnetico esterno

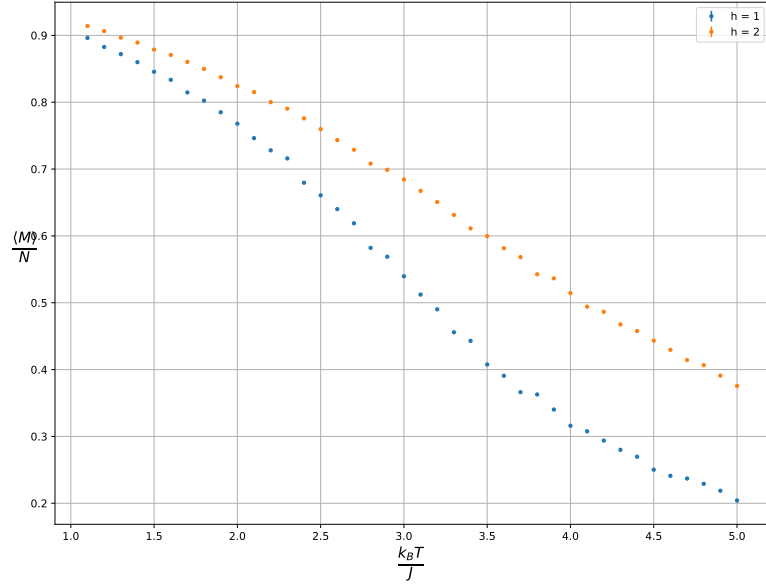


Figura 4: M/N in funzione di T con campo magnetico esterno

Come si può vedere dai grafici l'effetto del campo magnetico esterno è soprattutto quello di permettere un allineamento maggiore degli spin e di conseguenza una magnetizzazione maggiore a tutte le temperature. Dal punto di vista termodinamico l'effetto del campo magnetico contrasta il disordine creato dall'energia termica che tende a disallineare gli spin, aumentando dunque la temperatura a cui avviene la transizione di fase e mantenendo una magnetizzazione nel sistema fino a temperature molto più alte.