



1. Objetivos y metas

En esta práctica estamos interesados en resolver numéricamente el modelo de Ising (específicamente el problema de Onsager [1]) utilizando dos técnicas específicas que pertenecen a una amplia clase de métodos computacionales conocidos como métodos Montecarlo. Mediante una aplicación sencilla del algoritmo de **Metropolis-Montecarlo** haremos **evolucionar un sistema** de varias partículas en una red cuadrada **a un estado de equilibrio a temperatura T** , mientras que con la **integración Montecarlo** haremos el cálculo de varias **cantidades observables** del sistema.

El resultado que obtendremos de aplicar estas técnicas a sistemas de partículas cuyo grado de libertad relevante es el espín resulta en una primera descripción cuantitativa del *ferromagnetismo*. A lo largo del desarrollo de este trabajo, abriremos la puerta al estudio de conceptos muy interesantes e importantes en física de los siglos XX y XXI tales como la *universalidad* de ciertos fenómenos críticos y las *transiciones de fase*.

1. ¿Por qué es útil e importante el modelo de Ising?
2. ¿Qué son los métodos Montecarlo y para qué tipo de problemas son útiles?



2. Introducción y antecedentes

Antes de plantear y obtener el hamiltoniano del sistema que vamos a estudiar, hagamos un breve repaso de lo que sabemos del ferromagnetismo:

1. ¿Existe un modelo clásico que describa correctamente qué es el ferromagnetismo? Lean el teorema de Bohr-van Leeuwen para llevarse una súper sorpresa.
2. ¿Clásicamente, cuál es la diferencia entre el paramagnetismo, el diamagnetismo y el ferromagnetismo?

La respuesta anticipada a la primera pregunta es no, lo cual es un problema tanto para la termodinámica, así como para el electromagnetismo en términos de poder predecir la respuesta de materiales ferromagnéticos a campos electromagnéticos. Afortunadamente, está la mecánica cuántica lista para darnos las respuestas que buscamos.

2.1. Hamiltoniano del sistema

Consideremos un sistema de Ω átomos dentro de un contenedor a una presión y temperatura fijos y supongamos que inicialmente el sistema se encuentra en una fase gaseosa. El hamiltoniano total del sistema, \mathbf{H}_t , se puede escribir a partir de las diferentes contribuciones de los iones (núcleo + nube electrónica fuertemente amarrada) y los electrones de valencia (los de la capa más externa) que conforman a cada átomo

$$\mathbf{H}_t = \{\mathbf{H}_k^{e-} + \mathbf{H}_k^{\text{ion}} + \mathbf{H}_{\text{ion}}^{\text{ion}}\} + [\mathbf{H}_{\text{ion}}^{e-} + \mathbf{H}_{e-}^{e-}], \quad (1)$$

donde los términos de la forma \mathbf{H}_k^l son las partes cinéticas de los iones y electrones de valencia, $\mathbf{H}_{\text{ion}}^{\text{ion}}$ es la interacción entre los iones (típicamente electrostática) y $\mathbf{H}_{\text{ion}}^{e-} + \mathbf{H}_{e-}^{e-}$ los términos de interacción ion-electrón y electrón-electrón respectivamente. Si bajamos la temperatura gradualmente, en el límite $T \rightarrow 0$ el sistema se convierte en un sólido cristalino y la parte entre llaves $\{ \}$ del hamiltoniano junto con las condiciones a la frontera definen la *estructura cristalina del sistema*.

Ya que los átomos se han condensado en un sólido, con cada uno de ellos oscilando armónicamente alrededor de un sitio de la red cristalina, sabemos que tenemos un rango de temperaturas sobre el cual va a mantenerse estable en esa fase y nos interesa estudiar sus propiedades termodinámicas que emergen de la parte entre corchetes $[\]$ del hamiltoniano en dicho rango de temperaturas.

Como resolver todo el hamiltoniano completo es muy difícil (y para lo que queremos, innecesario), removemos de la descripción a los iones y nos quedamos solamente con los términos de interacción entre átomos que se encuentran fijos en una red.

- ¿Por qué creen que es físicamente razonable remover de la dinámica a los iones?, ¿hay algo que nos garantice que no estamos perdiendo información importante que podría resultar crucial en nuestro estudio?

Por simplicidad, la geometría de esta red la tomamos como cuadrada (figura 1) con una área $A = N^2\alpha^2$, y donde α es la longitud característica de la red.

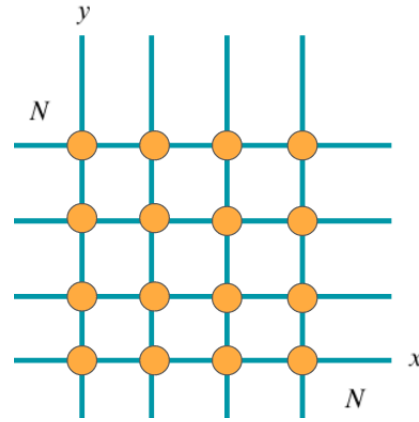


Figura 1. Red cristalina cuadrada en 2D con área $A = N^2\alpha^2$. Las bolitas naranjas corresponden a un átomo.

El término de interacción lo simplificamos por una descripción efectiva de interacción entre los átomos

$$\mathbf{H}_{\text{ion}}^{e-} + \mathbf{H}_{e-}^{e-} \rightarrow \mathbf{H}_{\text{átomo}}^{\text{átomo}}, \quad (2)$$

¿cómo sería la forma de este hamiltoniano? El único grado de libertad que nos interesa es el espín de cada átomo; podemos asumir que para el número de partículas y las escalas energéticas que nos interesan, la interacción ion-electrón es mucho menor a la electrón-electrón y por tanto sólo debemos considerar el acoplamiento debido los campos y momentos dipolares magnéticos de los átomos. Tenemos entonces que el j -ésimo átomo de la red genera un campo magnético en el sitio

donde se encuentra el átomo k de la forma

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_j(\mathbf{x}_k) &= \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{m}_j^s}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k\|^3}, \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu_B g_s}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k\|^3} \mathbf{S}_j.\end{aligned}\quad (3)$$

con μ_B el magnetón de Bohr y g_s y \mathbf{S}_j son el factor giromagnético de Landé y el vector de espín respectivamente.

De esta forma, el hamiltoniano de interacción entre los átomos quedaría como

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_a^a &= - \sum_{j \neq k}^N \mathbf{B}_j(\mathbf{x}_k) \cdot \mathbf{m}_k, \\ &= -J \sum_{\langle jk \rangle} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k \\ \Rightarrow E &\equiv -J \sum_{\langle jk \rangle} s_j s_k\end{aligned}\quad (4)$$

donde $s_l = \pm 1$ dependiendo de si la proyección del espín apunta hacia arriba o abajo del eje de cuantización; J es una constante que absorbe todos los coeficientes del campo y el momento dipolar magnéticos y la expresión $\langle jk \rangle$ indica que las sumas deben hacerse sobre los primeros vecinos de cada sitio de la red. Aquí les van unos ejercicios y preguntas

1. Arriba mencioné que podemos ignorar las interacciones entre los espines de los iones y los electrones de valencia. ¿Por qué es esto válido? Les recomiendo que lean cómo son las correcciones a la energía de un sistema debido a la estructura hiperfina.
2. Partiendo de la expresión para el campo magnético de un dipolo, deduzcan la expresión (3). ¿Qué hay que tomar en cuenta con respecto a la geometría de la red y la dirección del eje de cuantización del espín?

3. De acuerdo a la expresión $s_l = \pm 1$ en el hamiltoniano, ¿cuál es la magnitud del espín del átomo?, ¿es esto correcto en general?.

4. Hagan todos los pasos intermedios para obtener la expresión para el hamiltoniano de interacción entre los átomos de la red y la energía. ¿Cuál es el paso crucial para sólo considerar las interacciones entre primeros vecinos?, ¿Sobre cuáles estados se calcula el valor esperado para obtener la energía?

5. ¿Cuál es la interpretación física de la constante J ?, ¿A qué cambio en el sistema corresponde un cambio en la J ?

6. Como veremos más adelante, hay un detalle muy importante en la ecuación (4). Si juntamos dos partículas de espín $1/2$, ¿cuál es la magnitud del espín total del sistema?, ¿Cuántos estados se forman?, ¿cuál es la probabilidad de que nos salga cada uno de ellos si hacemos una medición de alguna componente del espín?, ¿cuáles son los valores del espín total para cada caso?

Podríamos ser más ambiciosos y poner al sistema a interactuar con un campo auxiliar externo $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ y analizar su respuesta, pero eso ahora no nos interesa (¿por qué?). El hamiltoniano, junto con la geometría y dimensión de la red que hemos deducido, se conocen como el *modelo de Ising*, aunque es concretamente el problema de Onsager. Todos los detalles teóricos pueden encontrarlos muy bien detallados en las referencias [1] y [2], aunque se van a dar cuenta del dolor de cabeza que es trabajarlo teóricamente.



3. Métodos

La implementación del modelo de Ising que vamos a hacer sigue principalmente la referencia [4], en la cual se dedica un capítulo completo al modelo. Su trabajo consiste en integrar en el lenguaje de programación que manejan todos los pasos necesarios y que a continuación les enumero como guía.

3.1. Armado de la red y cálculo de la energía del sistema

Consideren una red cuadrada de $N \times N$, con N^2 el número de átomos que componen al sistema. Generen una lista con los primeros vecinos de cada sitio implementando condiciones periódicas a la frontera (lo cual es equivalente a transformar al plano en un toro). De esta forma, todos los sitios de la red tienen 4 vecinos. Ya que hayan hecho esto, calculen la energía de un par de configuraciones de espines y un valor de J .

3.2. Cálculo de la temperatura crítica del sistema

La cantidad que juega un papel fundamental en todo el análisis que hacemos es la temperatura crítica, T_c , que para el problema de Onsager se obtiene de resolver la siguiente ecuación trascendental

$$2 \tanh^2 \left(\frac{2J}{K_B T_c} \right) = 1. \quad (5)$$

Utilicen el algoritmo de Newton-Raphson o el comando que su lenguaje de programación utilice para calcular la temperatura crítica dado un valor de J .

3.3. Evolución y termalización del sistema

En física estadística, el objeto de mayor interés y a partir del cual se obtienen la ecuación de estado y todas las cantidades obser-

vables es la función de partición \mathcal{Z} , que en el ensamble canónico tiene la siguiente forma

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta E(\mathcal{C})}, \quad (6)$$

donde la suma corre sobre todas las posibles configuraciones \mathcal{C} que pueden tener los átomos en la red y $\beta = 1/K_B T$ es la beta térmica. Para ejemplificar lo absurdo que sería calcular la función de partición por fuerza bruta, dado un valor para $\beta > 0$, calculen la función de partición para redes de lado $N = [2, 3, 4, 5]$ y tomen el tiempo que se lleva en hacer el cálculo. ¿Qué tanto difieren los tiempos a medida que aumenta el tamaño de la red?

Una manera de sortear este problema es usando el *algoritmo de Metrópolis con Monte-carlo*, que se centra en el cálculo de probabilidades de transición entre dos diferentes configuraciones (eliminando así la necesidad de la función de partición) y que tiene por objetivo generar una colección de configuraciones de espines que obedezcan la distribución del ensamble canónico. El problema con esto es que para varias iteraciones, el algoritmo produce configuraciones altamente correlacionadas entre sí y que por tanto no obedecen la distribución.

Una vez que echen a andar al algoritmo de Metrópolis para que una configuración inicial \mathcal{C}_0 evolucione a la configuración que minimiza la energía del sistema, deben *termalizar* el sistema, que consiste en aproximar cuál es el número adecuado de configuraciones intermedias que deben descartar para juntar un conjunto de Q configuraciones $\{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \dots, \mathcal{C}_Q\}$ tal que todas sean estadísticamente independientes entre sí y que son las que usaran para calcular las cantidades observables del sistema. Los detalles de cómo se hace esto están en el libro y los platicaremos con detalle.

1. ¿Cuál es la distribución del ensamble canónico?, ¿para qué tipo de sistemas sirve?
2. ¿Cuál es la expresión para la probabilidad de transición entre dos configuraciones?, hagan la deducción y expliquen por qué no es necesaria la función de partición para su cálculo.
3. Elaboren un bosquejo de los pasos que componen el algoritmo M-M para nuestro caso.

Para aquellos de ustedes que estén interesados en cuestiones sobre si realmente un sistema estadístico evoluciona de forma parecida a como lo haría con el algoritmo de Metrópolis, **estamos fuertemente inclinados a decir que no**. Para ver un ejemplo muy claro donde esto no puede pasar, les recomiendo que lean en Wikipedia de qué va la paradoja de Levinthal.

Para un número de pasos adecuado, ¿cómo es la configuración final hacia la que evoluciona un sistema de espines inicialmente aleatorios cuando este está en la temperatura crítica? Hagan una imagen que muestre los valores de los espines en función de las posiciones de los átomos de la red.

3.4. Cálculo de cantidades observables

Queremos entender cómo varían con la temperatura diferentes cantidades del siste-

ma tales como la energía y magnetización absoluta promedio por sitio, $\langle \epsilon \rangle$ y $\langle |m| \rangle$, el calor específico para un campo constante, c_H , y la susceptibilidad magnética

$$\langle \epsilon \rangle = \langle E \rangle / N^2, \quad (7)$$

$$\langle M \rangle = \left[\sum_j s_j \right]_c, \quad (8)$$

$$\langle |m| \rangle = |\langle M \rangle| / N^2, \quad (9)$$

$$c_H = K_B \beta^2 [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2], \quad (10)$$

$$\chi = \beta [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2]. \quad (11)$$

Dado un valor $T > 0$ de la temperatura, una vez que el sistema haya termalizado, pueden calcular estas cantidades con un conjunto adecuado de configuraciones que salgan del algoritmo de Metrópolis con Montecarlo. El cómo se hacen los promedios utilizando las configuraciones que salen del algoritmo de M-M lo pueden consultar en los capítulos 14 y 19 del libro [4]. A esta forma de aproximar integrales se le conoce como *integración Montecarlo*.

Grafiquen para diferentes valores de la temperatura las 4 observables de interés, ¿cómo es el comportamiento de las observables en la temperatura crítica?



Referencias

- [1] Feynman, R.P., (1998), *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures (Frontiers in Physics)*, 1era Ed., CRC Press.
- [2] Tong, D., (2012), *Statistical Physics -University of Cambridge Part II Mathematical Tripos*. Disponible en línea a través de <https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/statphys.html>

- [3] Goldenfeld, N., (1992), *Lectures on phase transitions and the renormalization group*, 1era Ed., CRC Press.
- [4] Stickler, B., Schachinger, E., (2014), *Basic Concepts in Computational Physics*, 1era Ed, Springer.