

MODELO DE ISING 2D

PARA ESPINES QUE PUEDEN APUNTAR EN SOLO DOS DIRECCIONES



• Christopher Montalbán • Paulette Layana
Estudiantes Licenciatura en Astronomía Universidad Central

• Profesores: Alejandro Riveros y Juan Luis Palma

El modelo de Ising es una manera simple de modelar un sistema magnético. Mediante una regla de interacción, entre dipolos magnéticos fijos o espines, predice la transición de fase que ocurre en un ferromagneto real a una temperatura crítica (temperatura de Curie) T_c . Además, posee solución analítica para dos dimensiones.

La termodinámica es un tópico de la física que estudia cómo cambian las propiedades macroscópicas (que podemos ver o sentir) de los cuerpos o sistemas tales como temperatura, presión, magnetización y/o volumen, luego de que algún proceso es realizado mediante, por ejemplo, algún trabajo efectuado al sistema y/o calor transferido al sistema. Más aún, las propiedades macroscópicas de los cuerpos, como por ejemplo la temperatura, presión, volumen y magnetización, son efectos promedios de las propiedades microscópicas (que no podemos ver) del cuerpo. Precisamente la mecánica estadística estudia y explica la conexión entre las propiedades microscópicas de los cuerpos con las propiedades macroscópicas de los cuerpos.

En el caso particular de un material magnético, una de las propiedades macroscópicas interesantes de analizar es la magnetización; y de acuerdo con la conexión con lo microscópico, la magnetización corresponde al efecto promedio del ordenamiento de los espines de los átomos del material, respecto de alguna dirección (sentidos que adquieren). Se pueden modelar estos espines como flechas dispuestos en arreglos o redes (unidimensionales, bidimensionales o tridimensionales).

Entre estos modelos, el de Ising es una manera simple de modelar un sistema magnético. Mediante una regla de interacción entre dipolos magnéticos fijos o espines más cercanos, predice la transición de fase que ocurre en un ferromagneto real a una temperatura crítica (temperatura de Curie) T_c . Además, posee solución analítica incluso para dos dimen-

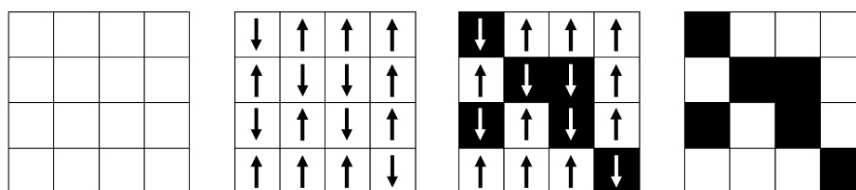


Figura 1

Representación esquemática del modelo de Ising en dos dimensiones.

siones, la famosa solución de Onsager. El modelo de Ising fue propuesto para estudiar sistemas magnetizables, prediciendo la fase de transición que ocurre bajo ciertas variables tales como la temperatura o largo, obteniendo la energía del sistema.

Mediante simulaciones computacionales y utilizando algoritmos especiales tal como el algoritmo de Metrópolis, se puede analizar la evolución de los espines frente a perturbaciones externas tales como un campo magnético o bien determinar cuales son las configuraciones de los espines compatibles con alguna propiedad macroscópica como por ejemplo con alguna temperatura del material (conectando lo microscópico con lo macroscópico). En este proyecto se aplicó el algoritmo de Metropolis para simular el modelo de Ising en 2 dimensiones y se obtuvieron las configuraciones de los espines compatibles con diferentes temperaturas junto a la magnetización que fue calculada como un promedio de las configuraciones (sentidos) de espines.

Concretamente, el sistema se compone de un arreglo bidimensional equiespaciado donde cada elemento representa un espín en un estado binario, +1 o -1, física-

mente hablando, si apuntan hacia arriba o hacia abajo, y representándose con colores, blanco o negro. La energía depende de las interacciones entre los espines cercanos, es decir, los primeros vecinos, los cuales corresponden a los elementos más cercanos del espín (ver figura 1). Además, se establecieron condiciones de borde periódicas, de manera que todos los elementos tengan sus primeros vecinos.

Se analizó, como la magnetización se ve afectada por propiedades físicas como: la temperatura, el tamaño de redes de espines y parámetros técnicos de la simulación como el número de pasos en el algoritmo Metrópolis. Tomando en cuenta que cada matriz inicial es generada aleatoriamente, además de comparar diferentes escenarios donde no hay magnetización neta de la red.

El modelo determina la energía producida por la interacción de los espines del material considerando sólo interacciones entre primeros vecinos, es decir, entre los espines más cercanos (según la ecuación 2). Para el caso de 2 dimensiones, al vecino de la derecha, de la izquierda, el de arriba y el de abajo (ecuación 1). Esta energía se conoce como la energía de exchange,

J. H. Hetherington

Compliment
of the authors



Two-, Three-, and Four-Atom Exchange Effects in bcc ^3He

J. H. Hetherington and F. D. C. Willard
Physics Department, Michigan State University, East Lansing, Michigan 48824
(Received 22 September 1975)

We have made mean-field calculations with a Hamiltonian obtained from two-, three-, and four-atom exchange in bcc solid ^3He . We are able to fit the high-temperature experiments as well as the phase diagram of Kummer *et al.* at low temperatures. We find two kinds of antiferromagnetic phases as suggested by Kummer's experiments.



Figura 2

portada de la publicación del gato de Hetherington. (https://en.wikipedia.org/wiki/F._D._C._Willard)

y existen incluso modelos en 3 dimensiones, para calcularla y soluciones analíticas solo hasta en 2 dimensiones. Existe una publicación [1] muy famosa al respecto, famosa no solo por su trasfondo científico, si no que también debido a que un gato es uno de los autores de este artículo. Si, un gato. Aunque suene extraño, en 1975 el profesor Hetherington, de la Universidad Estatal de Michigan, escribió su artículo como si hubiesen sido dos autores, diciendo "nosotros..." a través de todo el artículo. Luego se dio cuenta que era más fácil agregar un autor, que re-escribir todo el artículo (que en esos tiempos se hacía a máquina de escribir). Por lo que se le ocurrió la idea de agregar como autor a su gato. Bueno, en ese artículo, se utiliza la energía de exchange en tres dimensiones para calcular átomos de ^3He en una celda cúbica que tiene un átomo en cada esquina y uno justo al medio del cubo, a esta celda se le conoce como celda cúbica centrada en el cuerpo (Body Centered Cubic cell, BCC). En este trabajo solo trabajaremos en dos dimensiones.

Metodología

A partir de redes (matrices) cuadradas de tamaños 5×5 , 10×10 , 25×25 y 50×50 , generadas aleatoriamente con 1 y -1, se aplicó el algoritmo de Metropolis para encontrar la evolución de cada una de estas redes a diferentes temperaturas: $T = 1; 0.1; 0.01$ y 0.001 . El número de veces (pasos) que se realizó la evolución del sistema fue 50, 100, 500 y 1000 pasos en la simulación.

A través del código se decide la cantidad de pasos para el algoritmo de metrópolis, después se selecciona arbitrariamente un espín del arreglo, y se calcula la energía localizada (se entiende por localizada a los primeros vecinos) del sistema con la ecuación (1), donde 's' representa a la matriz de datos, luego se multiplica por el valor de la constante $J = -1$, para obtener la energía total del sistema (ec. (2)).

$$(1) \quad \epsilon_{i,j} = -s_{i,j}(s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1})$$

$$(2) \quad E\{s_\nu\} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$$

Se cambia el valor de ese espín aleatorio y se vuelve a calcular la energía total del sistema, después de tener ambas energías, pre y post cambio de espín, se evaluará si se acepta o no el cambio con la ecuación (3):

$$(3) \quad W = e^{-\frac{\Delta\epsilon}{k_B T}}$$

Donde $\Delta\epsilon$ es la diferencia de la energía del sistema post y pre cambio de espín, ' k_B ' la constante de Boltzmann, donde se tomará igual a 1 y ' T ' la temperatura del sistema.

Para decidir si se realizará un cambio de espín en el sistema, se toma un número aleatorio entre 0 y 1, y se comparará con la ecuación (3). Si el número aleatorio es menor a ' W ', ocurrirá el cambio de espín, modificando el sistema, en caso contrario, se conservará el sistema pre-volteo de espín. Esto se repetirá las veces que se estime conveniente.

Tras esto, se define la magnetización del sistema en cada paso:

$$(4) \quad M = \sum_{i=1}^{Lx} \sum_{j=1}^{Ly} S_{i,j}$$

Donde ' Lx ' y ' Ly ' son la cantidad de elementos en las filas y columnas, respectivamente.

Este algoritmo se repite la cantidad de veces necesarias para poder observar distintos cambios en el sistema.

Resultados

A continuación, la tabla 1 muestra los resultados obtenidos para una matriz de 5×5 . Se observa que en todos los intentos a diferentes temperaturas y diferentes número de iteraciones, la matriz converge a un estado saturado de la magnetización. Entiéndase como estado saturado, cuando todos los espines apuntan en una misma orientación. A este estado se le ha

llamado, 100%. Si no alcanzó un estado saturado de la magnetización, entonces hay espines apuntando en ambas direcciones, el porcentaje representa la diferencia de espines que apuntan en cierta dirección. Por ejemplo; en la tabla 2, a temperatura 1 y 50 pasos, fila 1 columna 1, se observa un valor de 6%, lo que representa que hay 6 espines más apuntando en una dirección, que en otra. Entonces, para este caso de 10×10 , con 100 espines, hay 53 espines apuntando en una dirección y 47 espines apuntando en la otra dirección. Para la magnetización global, se contrarresta un spin apuntando en una dirección junto con otro espín apuntando en la dirección contraria. Entonces en este caso, se contrarrestan 47 espines, y sobran $(53-47)=6$ espines, o 6% de los espines, apuntando en una dirección. Lo que lleva a un valor de 6% de magnetización de la muestra completa.

A pesar de que se realizaron varios intentos para sacar conclusiones, seleccionamos solo uno para demostrar los cambios observados y coincidencias. Por otro lado en la figura 4 se muestra un típico gráfico de la magnetización (normalizada) en función de los pasos de la simulación (número de iteraciones) para la red de 50×50 a baja temperatura, $T = 0,001$. Sin embargo, cabe señalar que es necesario hacer un estudio estadístico serio para obtener resultados confiables, el cual se podría lograr aumentando el número de pasos del algoritmo (aproximadamente unos 500.000 pasos) e incluyendo mejoras en el algoritmo para que el sistema relaje de manera más rápida a los estados compatibles con la temperatura del sistema, complementando por ejemplo con códigos de "sobre-relajación" usando computadores profesionales con mayor capacidad de cálculo.

Análisis

Se observa que mientras más pequeño sea el arreglo, existe una mayor probabilidad de encontrar un estado saturado de magnetización.

Se observa que a mayor número de iteraciones, existe una mayor probabilidad de encontrar un estado saturado de magnetización.

Se observa que a una temperatura más baja, existe una mayor probabilidad de encontrar un estado saturado de magnetización.

Se deben realizar más simulaciones para poder obtener datos confiables y poder realizar una estadística seria, ya que, las tablas anteriores se confeccionaron con solo un intento, como también de disponer de más potencia computacional si se quieren realizar pruebas macro de redes más grandes o durante más pasos.

También, debido a que la simulación con Metrópolis del modelo de Ising se basa en una realización probabilística, los resultados pueden variar significativamente con un solo intento. A pesar de ello, tanto el tamaño de la matriz como la temperatura seleccionada y la cantidad de pasos afectan pero, al observar las tablas podemos destacar

L1: 5x5	T1:1	T2:1e-1	T3:1e-2	T4:1e-3
N1:50	100%	100%	100%	100%
N2:100	100%	100%	100%	100%
N3:500	100%	100%	100%	100%
N4:1000	100%	100%	100%	100%

Tabla 1: Matriz 5x5 con sus respectivas temperaturas y pasos.

L1: 10x10	T1:1	T2:1e-1	T3:1e-2	T4:1e-3
N1:50	6%	40%	100%	100%
N2:100	100%	100%	100%	100%
N3:500	100%	20%	100%	100%
N4:1000	100%	100%	100%	100%

Tabla 2: Matriz 10x10 con sus respectivas temperaturas y pasos.

L1: 25x25	T1:1	T2:1e-1	T3:1e-2	T4:1e-3
N1:50	11.68%	95.52%	62.56%	44%
N2:100	31.52%	100%	100%	87.84%
N3:500	100%	100%	100%	100%
N4:1000	100%	100%	100%	100%

Tabla 3: Matriz 25x25 con sus respectivas temperaturas y pasos.

L1: 50x50	T1:1	T2:1e-1	T3:1e-2	T4:1e-3
N1:50	5.28%	27.04%	27.28%	57.28%
N2:100	10.88%	59.68%	70.8%	80.88%
N3:500	42%	100%	23.92%	100%
N4:1000	100%	100%	100%	100%

Tabla 4: Matriz 50x50 con sus respectivas temperaturas y pasos.

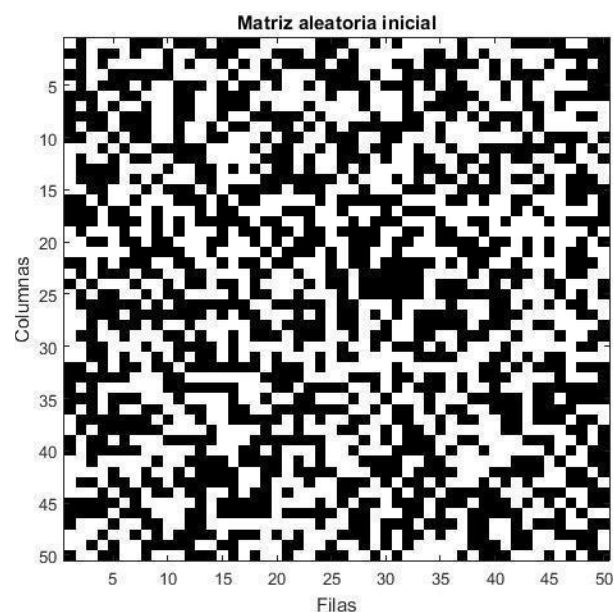


Figura 3

Ejemplo de matriz 50x50, donde los cuadros negros representan espines negativos (-1) mientras que los blancos espines positivos (1).

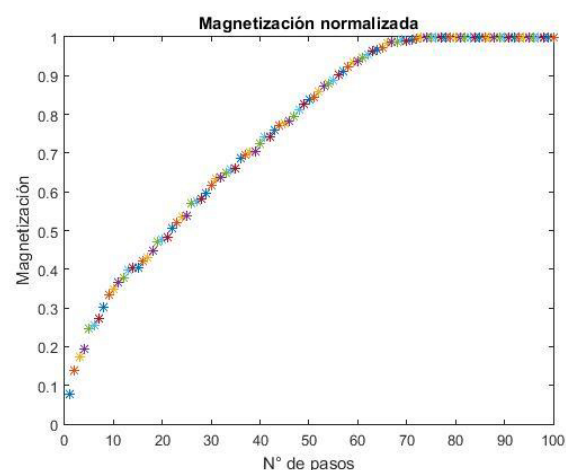


Figura 4

Gráfico de magnetización normalizada de una red 50 x 50 a temperatura $T = 0,001$ para 100 pasos del algoritmo.

que para las matrices de 5x5, 10x10 y 25x25 afecta considerablemente el tamaño de la red y la temperatura seleccionada, mientras que para la matriz de 50x50, la cantidad de pasos seleccionada para cada temperatura es un factor relevante, llevándonos a concluir que mientras más grande la matriz, se necesita una mayor cantidad de pasos para propiciar la magnetización del sistema a distintas temperaturas o al contrario, a menor tamaño de la red de espines, a temperaturas bajas y con pasos del algoritmo grandes, se propicia la magnetización del sistema.

Referencias

[1] Hetherington, J. H.; Willard, F. D. C. (1975), "Two-, Three-, and Four-Atom Exchange Effects in bcc ^3He ", Physical Review Letters, 35 (21): 1442–1444.