

Simulaciones en sistemas magnéticos frustrados

F. A. Gómez Albarracín

**Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLySIB)
(CONICET - UNLP)**

3er Workshop en Técnicas de Programación Científica

Universidad Nacional de Quilmes, 7.3.18

Simulaciones en sistemas magnéticos frustrados (¡muuuuy poquito!)

F. A. Gómez Albarracín

**Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLySIB)
(CONICET - UNLP)**

3er Workshop en Técnicas de Programación Científica

Universidad Nacional de Quilmes, 7.3.18

■ ¿Qué es la materia condensada?

(1)

(inspirado en el libro “The Oxford Solid State Basics” de Steve Simos, Cap. 1)

“La física de la **materia condensada** es el campo de la **física** que se ocupa de las características físicas macroscópicas de la **materia**. En particular, se refiere a las fases “condensadas” que aparecen siempre en que el número de constituyentes en un sistema sea extremadamente grande y que las interacciones entre los componentes sean fuertes. Los ejemplos más familiares de fases condensadas son los sólidos y los líquidos, que surgen a partir de los enlaces y uniones causados por interacciones electromagnéticas entre los átomos” (**Wikipedia**)

■ ¿Qué es la materia condensada?

(2)

(inspirado en el libro “The Oxford Solid State Basics” de Steve Simos, Cap. 1)

- El término materia condensada lo acuñó **Philip Anderson** (premio Nobel 1977) en 1967 al renombrar su grupo de investigación
- Se estima que alrededor de **un tercio** de los físicos del mundo trabajan en esta área: desde temas aplicados, por ej. cercanos a la ingeniería, hasta temas abstractos como las teorías de cuerdas o físico matemática
- Interdisciplina! Materia condensada blanda, materia activa, etc.

■ ¿Por qué estudiar materia condensada? ⁽³⁾

(inspirado en el libro “The Oxford Solid State Basics” de Steve Simos, Cap. 1)

- **Porque es el mundo a nuestro alrededor:** por qué los metales son brillantes y se sienten fríos, por qué el vidrio es transparente
- **Porque es útil:** Ej: semiconductores
- **Porque es profundo:** Ej.: ideas como bosón de Higgs, renormalización, universalidad, topología
- **Porque el reduccionismo no funciona:** no alcanza con preguntar de qué está hecho algo
- **Porque es un laboratorio:** física estadística y cuántica

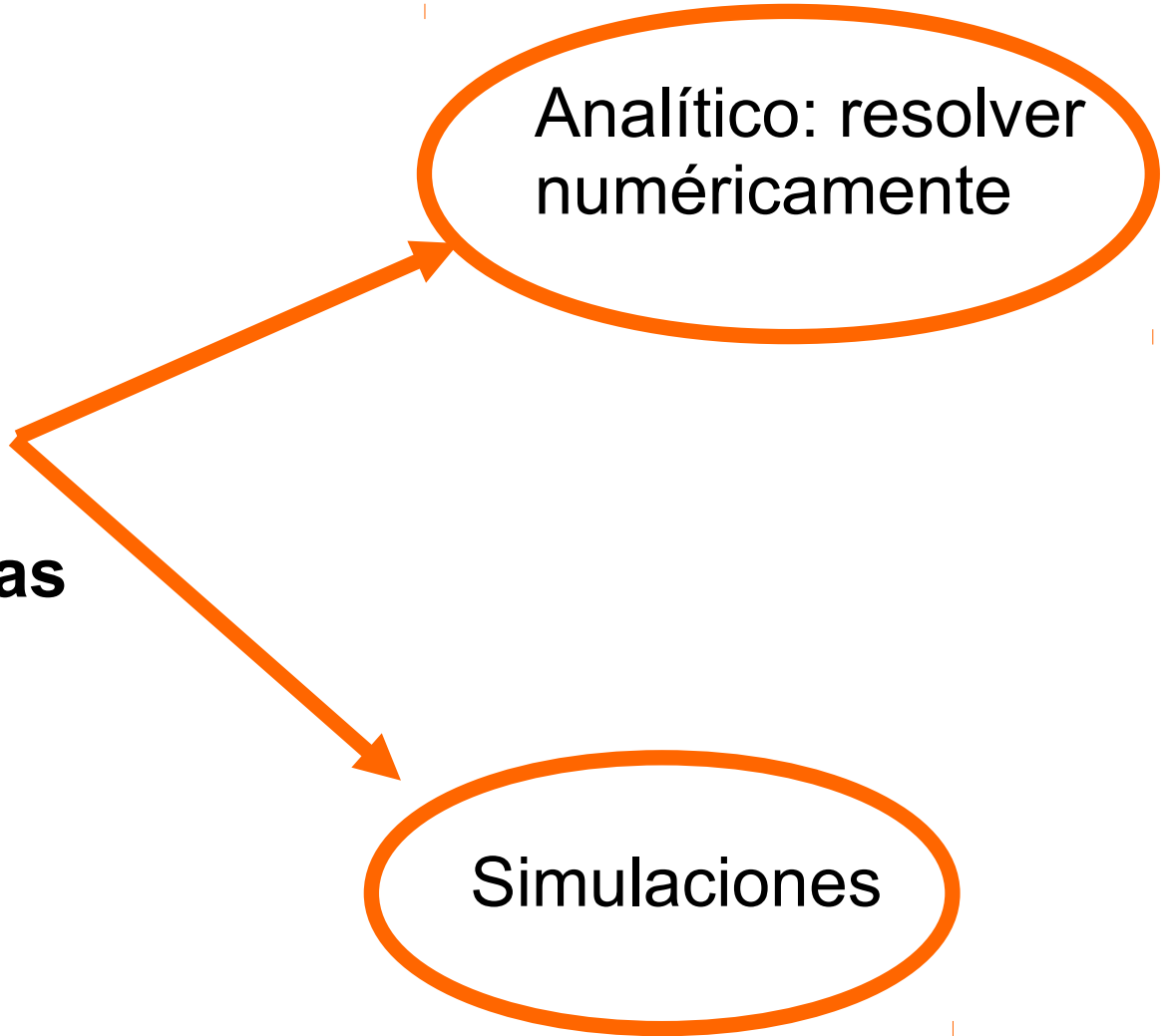
■ ¿Por qué se precisa la computadora para trabajar en materia condensada?

(4)

Según qué tipo de estudio se quiera hacer, es necesario considerar un **gran número de partículas** (por ej. núcleos de átomos, electrones)

Analítico: resolver numéricamente

Simulaciones



■ ¿Por qué se precisa la computadora para trabajar en materia condensada?

(4)

Según qué tipo de estudio se quiera hacer, es necesario considerar un **gran número de partículas** (por ej. núcleos de átomos, electrones)

APROXIMACIONES!!!

Analítico: resolver numéricamente

Simulaciones

■ Simulaciones: Un ejemplo popular

(5)

Modelo de Ising: cómo interactúan entre sí dos momentos magnéticos (“espines”) (1925)

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

■ Simulaciones: Un ejemplo popular

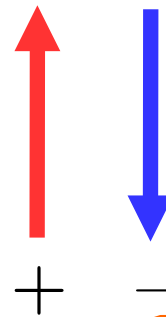
(5)

Modelo de Ising: cómo interactúan entre sí dos momentos magnéticos (“espines”) (1925)

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

σ_i

Espín. Vale +1 ó -1



■ Simulaciones: Un ejemplo popular

(5)

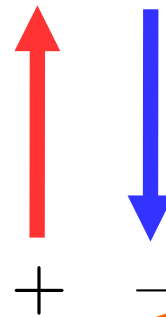
Modelo de Ising: cómo interactúan entre sí dos momentos magnéticos (“espines”) (1925)

$$H = -J \sum \sigma_i \sigma_j$$

$\langle i, j \rangle$ → primeros vecinos

σ_i

Espín. Vale +1 ó -1



■ Simulaciones: Un ejemplo popular

(5)

Modelo de Ising: cómo interactúan entre sí dos momentos magnéticos (“espines”) (1925)

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

Constante de intercambio

primeros vecinos

σ_i Espín. Vale +1 ó -1

+ -

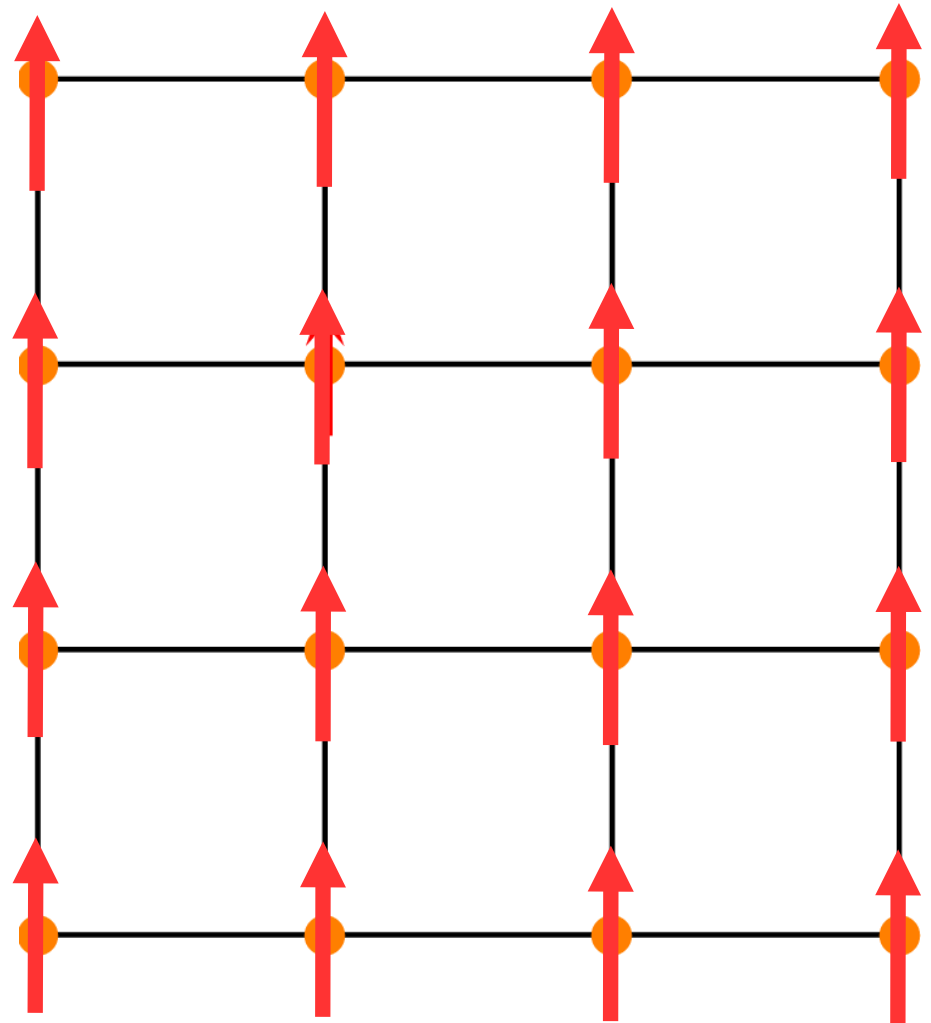
■ Modelo de Ising

(6)

Modelo de Ising: solución exacta en 1D y en 2D para la red cuadrada

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

Estado de menor energía: todos los espines iguales (todos + o -)



■ Modelo de Ising

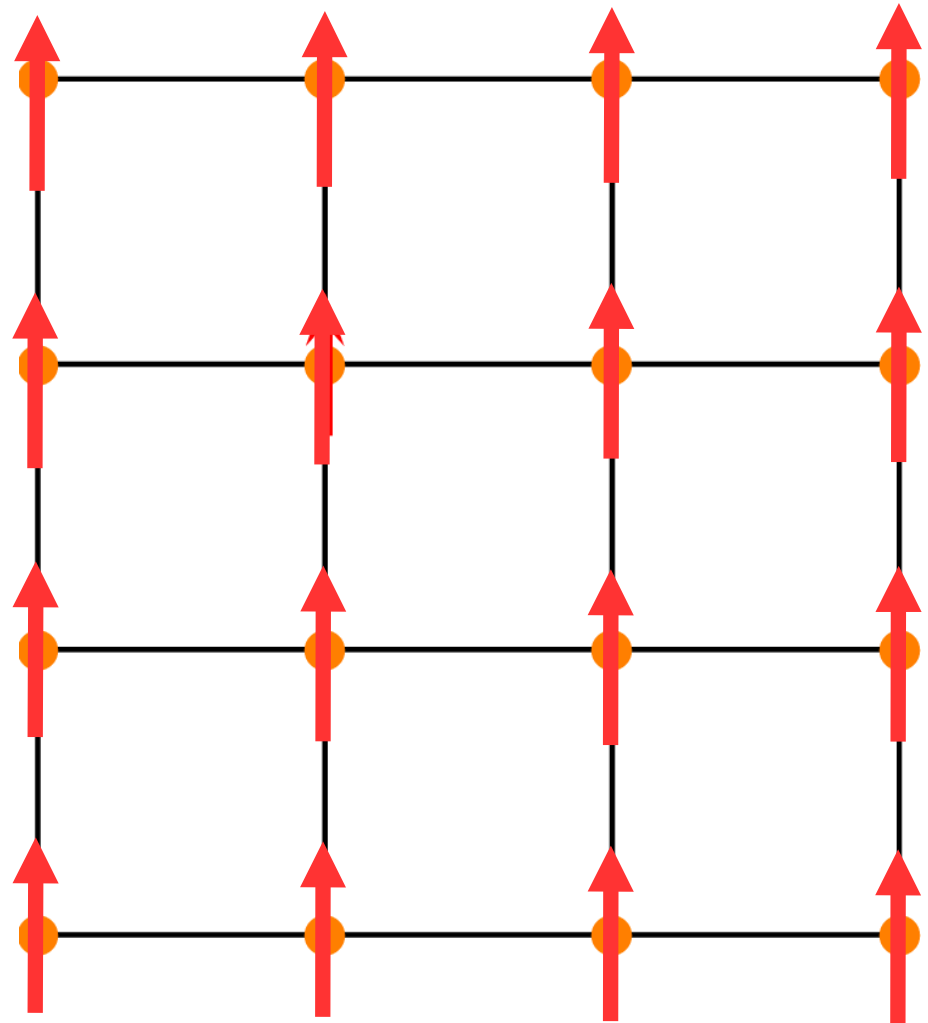
(6)

Modelo de Ising: solución exacta en 1D y en 2D para la red cuadrada

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

Estado de menor energía: todos los espines iguales (todos + o -)

¿Qué significa solución exacta?



■ Modelo de Ising

(6)

Modelo de Ising: solución exacta en 1D y en 2D para la red cuadrada

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

Estado de menor energía: todos los espines iguales (todos + o -)

¿Qué significa solución exacta?



■ Un poco de estadística

(7)

Función de partición canónica (número fijo de partículas).

$$Z = \sum_{\{\sigma_i \pm 1\}} \exp^{-\frac{H(\sigma_i)}{k_B T}}$$

A partir de ésta pueden calcularse diferentes **valores medios de cantidades físicas**. Por ejemplo:

$$U = \langle H \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial (1/k_B T)} = \frac{\sum_{\{\sigma_i \pm 1\}} H \exp^{-\frac{H}{k_B T}}}{\sum_{\{\sigma_i \pm 1\}} \exp^{-\frac{H}{k_B T}}}$$

Valor medio de la energía

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial (T)} = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{k_B T^2}$$

Calor específico

■ Un poco de estadística

(7)

Función de partición canónica (número fijo de partículas).

$$Z = \sum_{\{\sigma_i \pm 1\}} \exp^{-\frac{H(\sigma_i)}{k_B T}}$$

Temperatura

Todas las configuraciones posibles

A partir de ésta pueden calcularse diferentes **valores medios de cantidades físicas**. Por ejemplo:

$$U = \langle H \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial (1/k_B T)} = \frac{\sum_{\{\sigma_i \pm 1\}} H \exp^{-\frac{H}{k_B T}}}{\sum_{\{\sigma_i \pm 1\}} \exp^{-\frac{H}{k_B T}}}$$

Valor medio de la energía

Peso ó probabilidad

“normalización” (Z)

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial (T)} = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{k_B T^2}$$

Calor específico

Quando la T es muy alta, todas las configuraciones pueden considerarse equiprobables

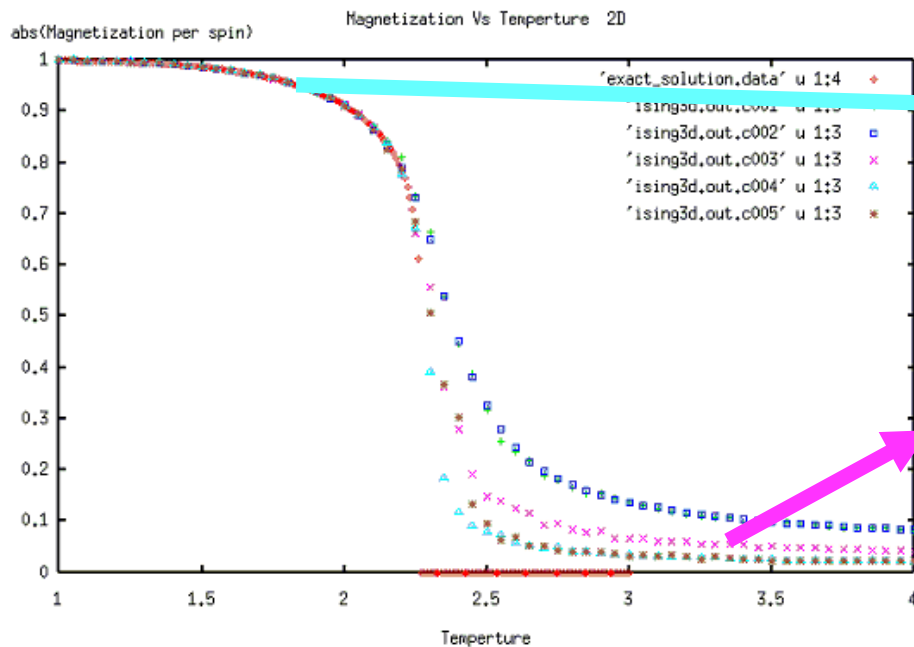
■ ¿Y las simulaciones?

(8)

Necesitamos simulaciones para obtener el comportamiento con temperatura en casos que no podemos resolver (¡la mayoría!).

El modelo de Ising en la red cuadrada es un gran ejercicio/ejemplo del uso de simulaciones.

Una característica del modelo de Ising es que posee una **transición de fase**. A una dada **$T=T_c$** , el sistema pasa de estar **desordenado a estar ordenado**



Magnetización por espín tiende a valer 1 ó -1, el valor cuando están todos alineados (baja temperatura, sistema ordenado)

A alta T el sistema está desordenado, la magnetización es cero

Figura tomada de <http://phycomp.technion.ac.il/~lior/1D&2DVsTheory.html>

■ ¿Qué simulaciones podemos hacer? (9)

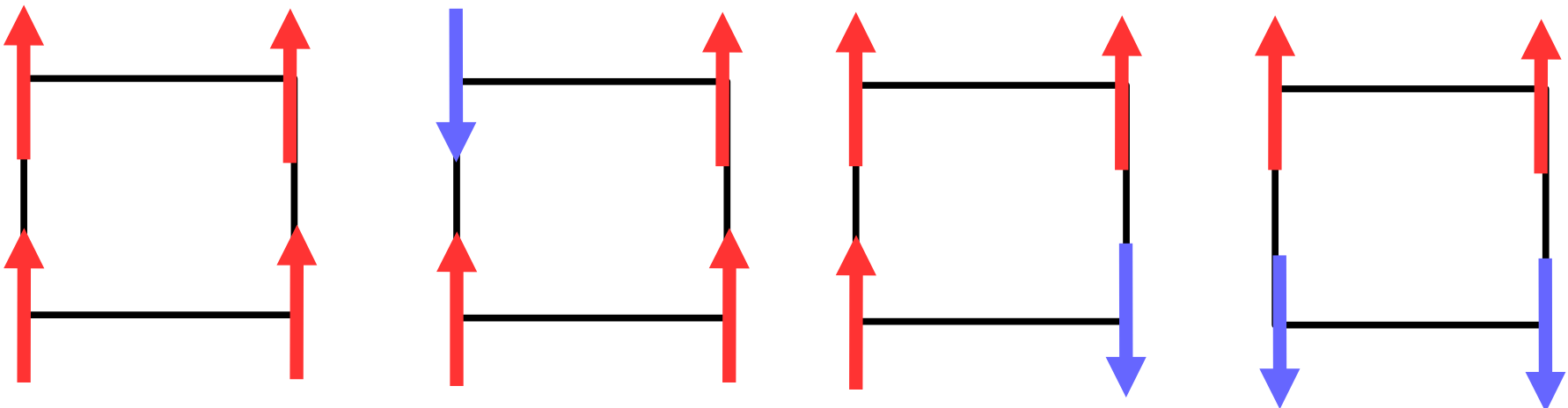
- Es **MUY importante** buscar el **algoritmo adecuado** para lo que querramos hacer. Siempre **buscar información**: preguntar, leer artículos, libros, etc.
- En particular, para el **modelo de Ising** es muy conocido el llamado ***Metropolis Monte Carlo***
- **OJO! No es el único.** Según que estemos queriendo calcular, podemos usar por ejemplo el llamado algoritmo de Wang Landau, o el algoritmo de clusters.
- Es importante saber y estudiar las **características de cada algoritmo**, en particular sus **limitaciones, ventajas y desventajas**.
- **Si vamos a probar algo nuevo, probarlo primero con algo conocido ...** y volvemos al modelo de Ising en la red cuadrada!

Metropolis Monte Carlo

(10)

- ¿Por qué se llama Monte Carlo?
- Monte Carlo se le llama al uso de números al **azar**. Puede usarse para diversas cosas, por ejemplo para calcular integrales.
- ***Metropolis Monte Carlo***: ¿por qué lo usamos? Para un modelo como el de Ising en la red cuadrada podría calcular “a mano” las configuraciones simplemente dando vuelta espines (pasando de + a – o viceversa).

Ejemplos: red de 2x2



Metropolis Monte Carlo

(10)

- ¿Por qué se llama Monte Carlo?

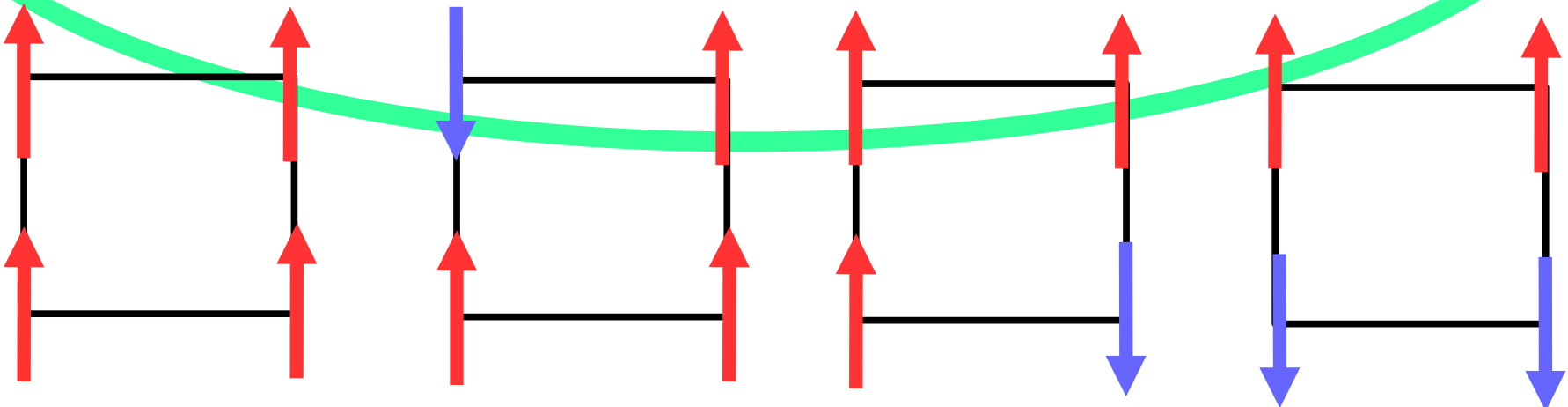
- Monte Carlo se utiliza para calcular cosas que no se pueden calcular de otra manera. Se usa para diversas cosas.

¿Cuál es el **problema** con hacer esto?

¿**Cuántas configuraciones** hay en una red de 2x2?

¿y en una de 10x10?

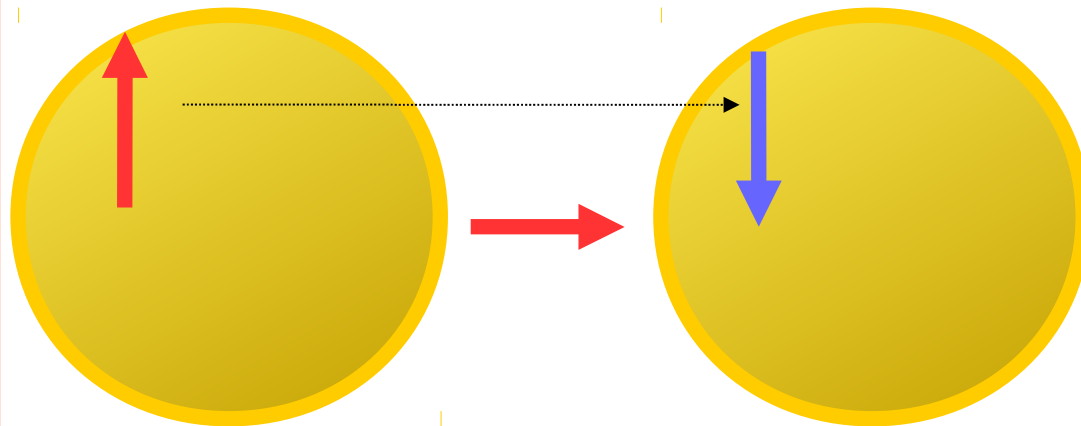
Ej



Metropolis Monte Carlo

(11)

- Necesitamos simulaciones para estudiar sistemas de **muchas partículas**.
- En el algoritmo de Metrópolis la idea básica es que **se recorre el espacio de configuraciones a una dada temperatura T**, teniendo en cuenta la **distribución de probabilidades** que nos da la mecánica estadística.
- Para recorrer este espacio, se parte de una dada configuración al azar. Se da vuelta un espín elegido al azar.



Configuración A

Configuración B

Si $E_B < E_A$

Nos quedamos con esta configuración. Pero, si $E_B > E_A$

Aceptamos ó no el cambio a partir de comparar su probabilidad p con el peso estadístico.

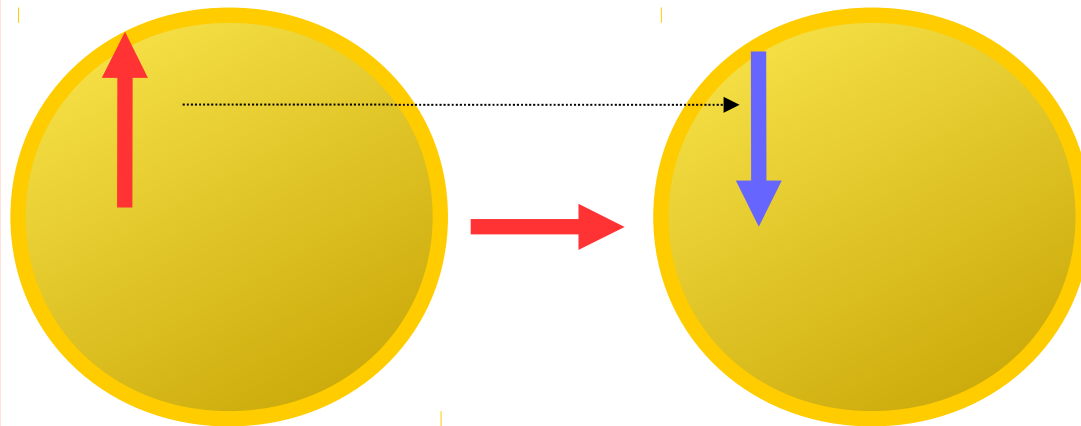
$$p < \exp \frac{-(E_B - E_A)}{k_B T}$$

El número p es un número al azar entre 0 y 1

Metropolis Monte Carlo

(11)

- Necesitamos simulaciones para estudiar sistemas de **muchas partículas**.
- En el algoritmo de Metrópolis la idea básica es que **se recorre el espacio de configuraciones a una dada temperatura T**, teniendo en cuenta la **distribución de probabilidades** que nos da la mecánica estadística.
- Para recorrer este espacio, se parte de una dada configuración al **azar**. Se da vuelta un espín elegido al **azar**.



Configuración A

Configuración B

Si $E_B < E_A$

Nos quedamos con esta configuración. Pero, si $E_B > E_A$

Aceptamos ó no el cambio a partir de comparar su probabilidad p con el peso estadístico.

$$p < \exp \frac{-(E_B - E_A)}{k_B T}$$

El número p es un **número al azar** entre 0 y 1

■ Metropolis Monte Carlo

(11)

• Necesitamos un generador de números al azar para el algoritmo de Metropolis

• En el código de configuración de parámetros

• Para cada vuelta

Es **MUY IMPORTANTE** el **GENERADOR DE NÚMEROS AL AZAR**

¡No usen simplemente el “random” del lenguaje!

Hay muchos generadores descritos en la literatura.

Configuración A

Configuración B

El número p es un **número al azar** entre 0 y 1

ón

a

E_A

de

■ Complicando los modelos: sistemas frustrados

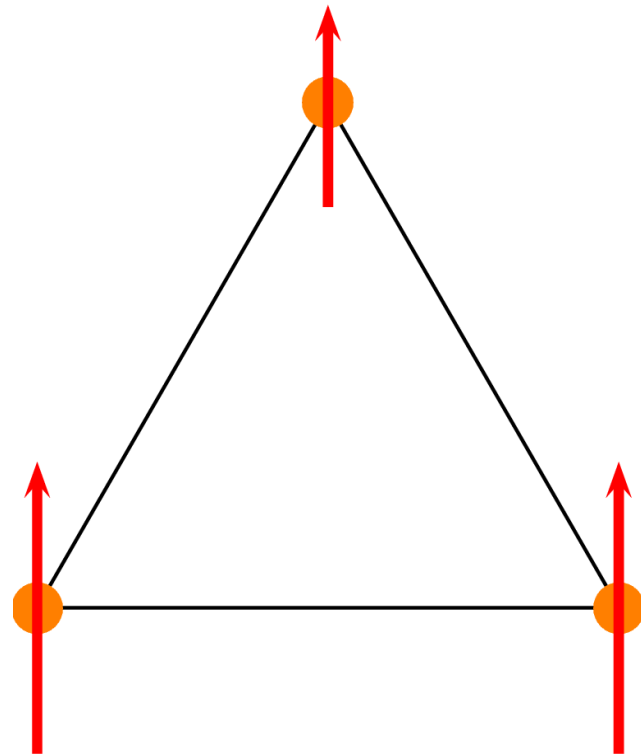
(12)

Frustración: Imposibilidad de minimizar todas las interacciones simultáneamente

Ejemplo típico: red triangular

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

$J < 0$: el estado de menor energía sería con todos los espines paralelos



■ Complicando los modelos: sistemas frustrados

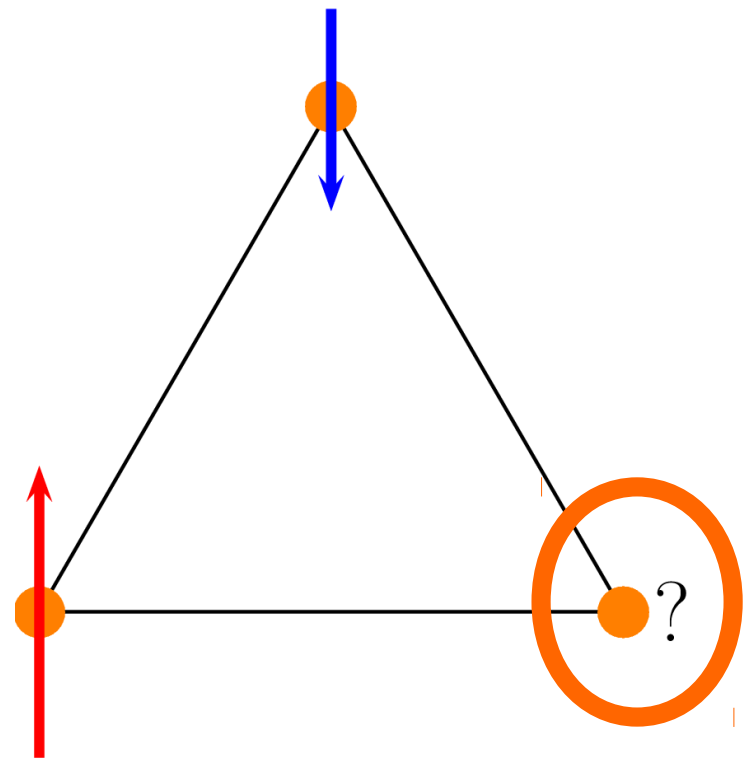
(13)

Frustración: Imposibilidad de minimizar todas las interacciones simultáneamente

Ejemplo típico: red triangular

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

$J > 0$: ¡ya no es tan fácil!
Como **no se puede minimizar la energía de todos los enlaces**, se dice que el sistema está **frustrado**



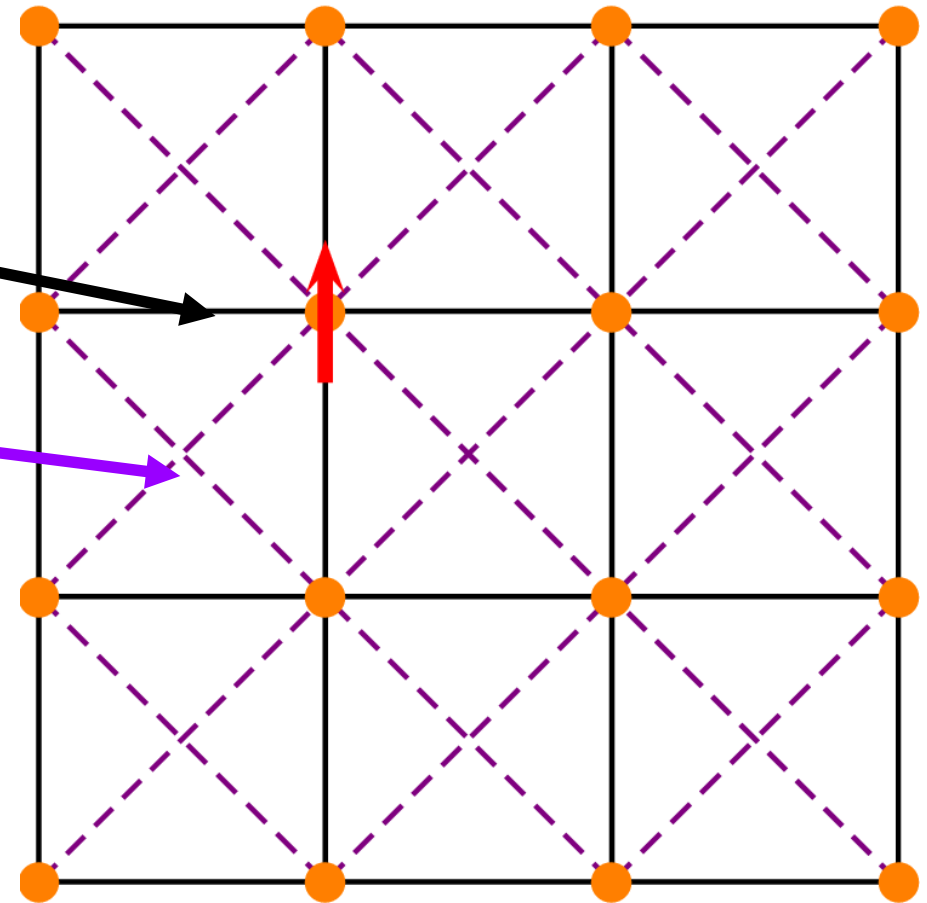
■ Complicando los modelos: sistemas frustrados

(14)

Podemos frustrar la red cuadrada poniendo más interacciones entre espines.

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j +$$

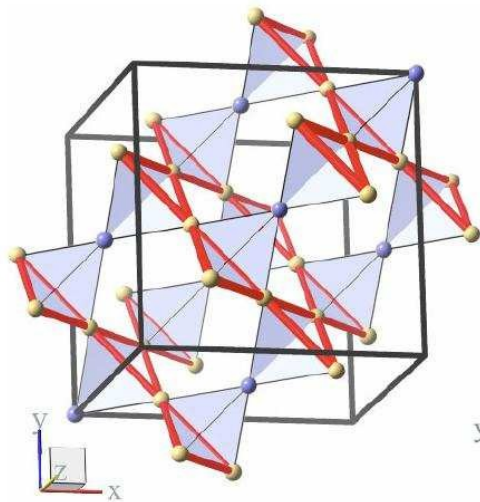
$$+ J_2 \sum_{\langle\langle k,l \rangle\rangle} \sigma_k \sigma_l$$



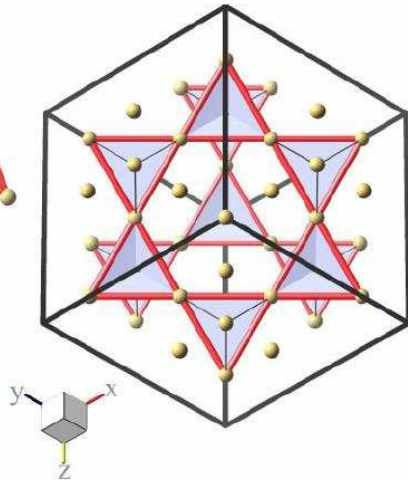
■ Ejemplos de sistemas frustrados

(15)

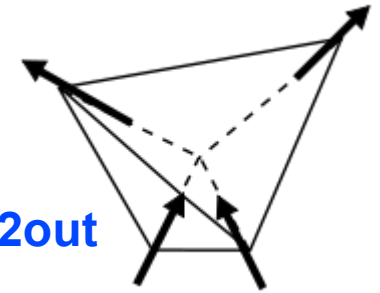
Hielos de spin ($\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ y $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$)



Red de pirocloro



Vista de la red desde la dirección [111]



Reglas del **hielo**: **2in 2out**

- Iones de tierras raras forman una red de **pirocloro**
- Campo cristalino: fija la dirección de los momentos magnéticos → **Ising local**
- Sistema frustrado: “**reglas del hielo**”
- Entropía finita a $T=0$
- Modelos: exchange (primeros vecinos) + dipolares (interacciones entre todos los sitios)

■ Monte Carlo en sistemas frustrados

(16)

- **Los sistemas se complican muy rápido muy fácilmente.**
- Si tenemos que estudiar variaciones del modelo, seguramente necesitemos hacer **varias corridas**. Y muy probablemente tengamos que utilizar redes con **muchos sitios**

■ Monte Carlo en sistemas frustrados

(17)

- **Los sistemas se complican muy rápido muy fácilmente.**
- Si tenemos que estudiar variaciones del modelo, seguramente necesitemos hacer **varias corridas**. Y muy probablemente tengamos que utilizar redes con **muchos sitios**



Necesidad de
**OPTIMIZAR
EL CÓDIGO**

- Pasar a un **lenguaje** como C o fortran
- No trabajar con **interfaces**
- **Compile** optimizando
- Tener cuidado con **cómo y dónde definimos las variables**
- **Comentar** la parte del código que **no estamos usando** según qué querramos calcular
- Minimizar el cálculo por ej. de **funciones trigonométricas** en la medida de lo posible
- Cuidado con la forma de escribir a **archivos** y de **imprimir en pantalla**
- Utilizar toda la **información del sistema** que puedan!!!

■ Monte Carlo en sistemas frustrados

(18)

Algunas sugerencias de “**buenas prácticas**” a la hora de trabajar:

- Indicar al principio del **archivo para qué es**, cuándo se hizo, quién lo hizo, modificaciones, etc.
- **Comentar el código**. No sólo para compartir con otras personas, si no también para poder mirarlo de nuevo en un tiempo y entender
- **Programas y ejecutables con nombres claros** (que no sea todo “gfortran Test.f90 -o salida”)
- **Archivos de salida con nombres que indiquen precisamente** qué son, no importa si son largos
- **Headers** en los archivos de salida, especialmente si se guardan columnas de datos
- **Guardar siempre un código que ande bien**, más allá de las modificaciones que se vayan introduciendo

■ Algunas otras técnicas numéricas

(19)

- Integración
- Minimización
- Diagonalización de matrices
- Técnicas **específicas** para diversos problemas de materia condensada cuántica: diagonalización exacta (**ED**), grupo de renormalización de la matriz densidad (**DMRG**)

■ Algunas otras técnicas numéricas

(19)

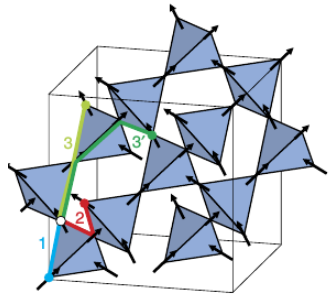
- Integración
- Minimización
- Diagonalización de matrices
- Técnicas **específicas** para diversos problemas de materia condensada cuántica: diagonalización exacta (**ED**), grupo de renormalización de la matriz densidad (**DMRG**)

ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations)

The ALPS project (Algorithms and Libraries for Physics Simulations) is an open source effort aiming at providing high-end simulation codes for strongly correlated quantum mechanical systems as well as C++ libraries for simplifying the development of such code. ALPS strives to increase software reuse in the physics community.

■ Y al final ¿sirve el Monte Carlo?

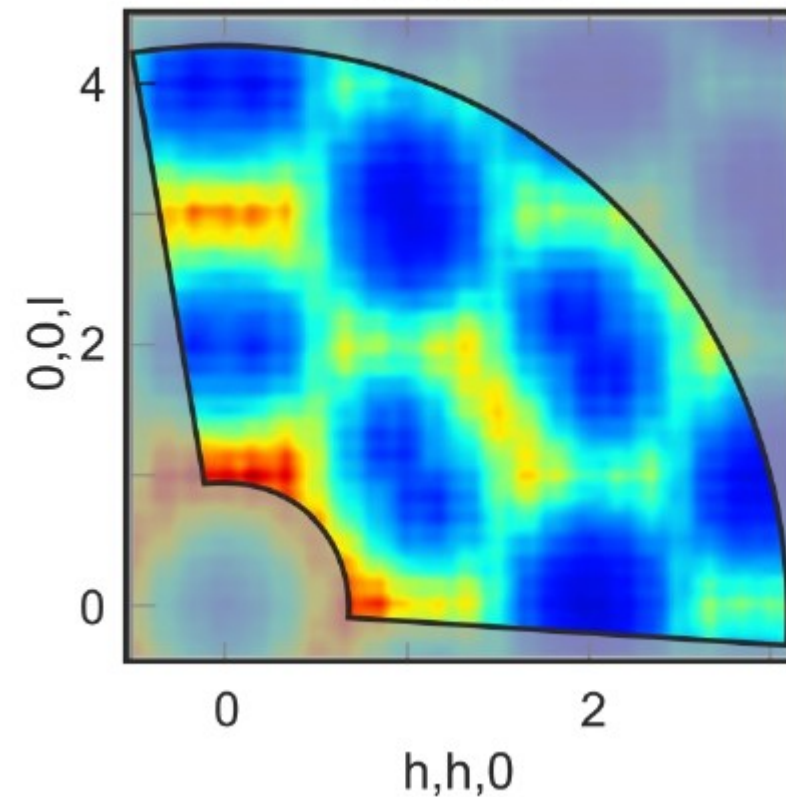
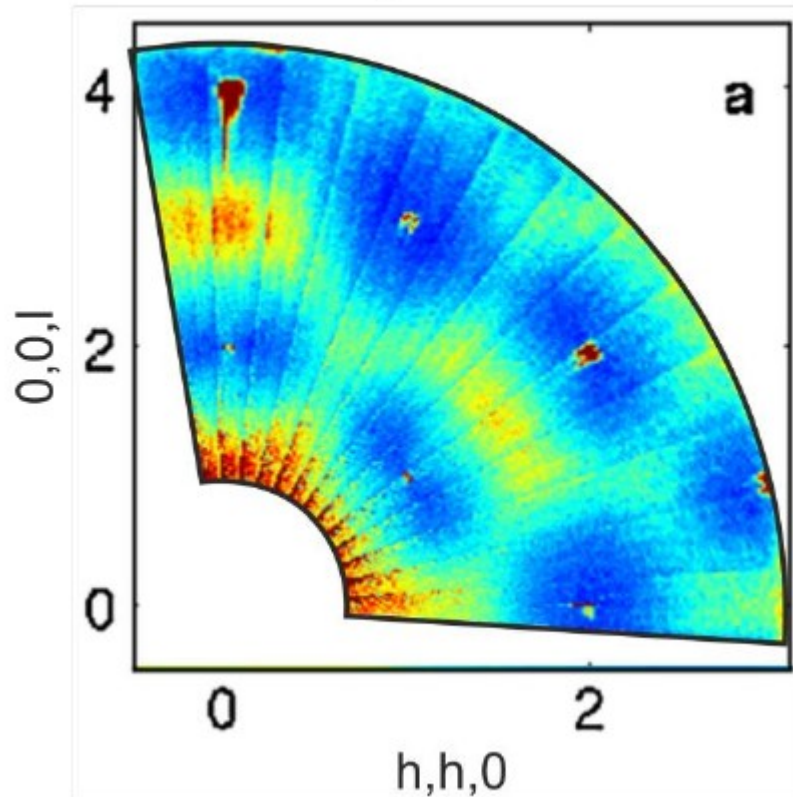
(20)



$$\mathcal{H}_d = J_1 \sum_{\langle ij \rangle > 1} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{\langle ij \rangle > 2} \sigma_i \sigma_j + J_3 \sum_{\langle ij \rangle > 3} \sigma_i \sigma_j + J'_3 \sum_{\langle ij \rangle > 3'} \sigma_i \sigma_j$$
$$+ D r_1^3 \sum_{ij} \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{|\mathbf{r}_{ij}|^5} \right] - \mu \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{B}$$

Experiment

Simulation



Factor de estructura experimental para Dy₂Ti₂O₇ y el obtenido por simulaciones. Figura tomada de Borzi et al., Nat. Comms. 2016

■ Comentarios finales

(21)

- Analizar qué se quiere estudiar (cómo, por qué, condiciones del estudio, etc)
- Buscar técnicas adecuadas para ese problema
- Encontrar formas de chequear el propio código y los resultados (no solamente que no haya bugs)
- Ser lo más prolijo posible
- **No dejarse estar:** buscar información, preguntar, aprender lenguajes nuevos, nuevos algoritmos, probar algún programa que se recomienda, etc.

¡GRACIAS!