Métodos Computacionais em Física: Mecânica Estatística

Aula: Modelo de Ising em 1D.

Aula: Modelo de Ising 1D - Objetivos

Ao final desta aula, você deverá ser capaz de:

1) Formular o modelo de Ising para sistemas magnéticos.
2) Utilizar o algorítmo de Metrópolis para calcular a magnetização e a configuração de mais baixa energia do modelo de Ising.
3) Implementar o Método de Monte Carlo/Metrópolis para o cálculo da magnetização no modelo de Ising (com condições periódicas de contorno).

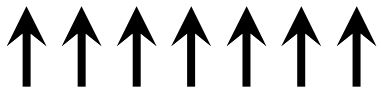
Tarefa: Calculo da magnetização do modelo de Ising em 1D com Monte Carlo.

Tempo aproximado: 30 a 40 min (lembrando que o *debug* é a maior parte disso!).

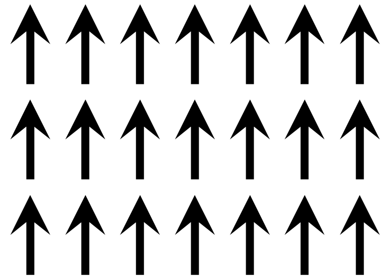
Fases magnéticas.

Ferromagnetismo: spins se alinham em uma determinada direção $\rightarrow$ M≠0.

1D:

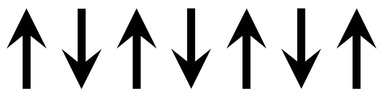


2D:

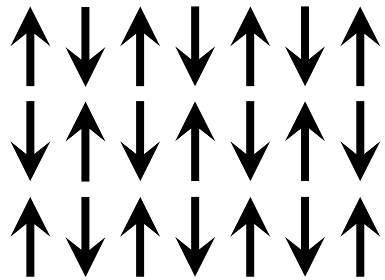


Antiferromagnetismo: spins se alinham alternadamente $\rightarrow$ M=0.

1D:

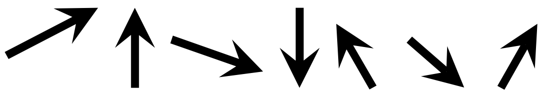


2D:

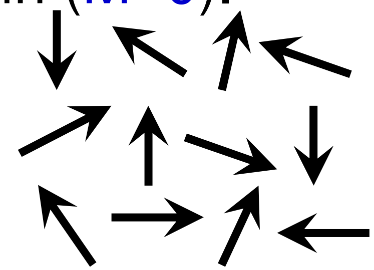


Paramagnetismo: não há ordenamento de spin (M=0).

1D:

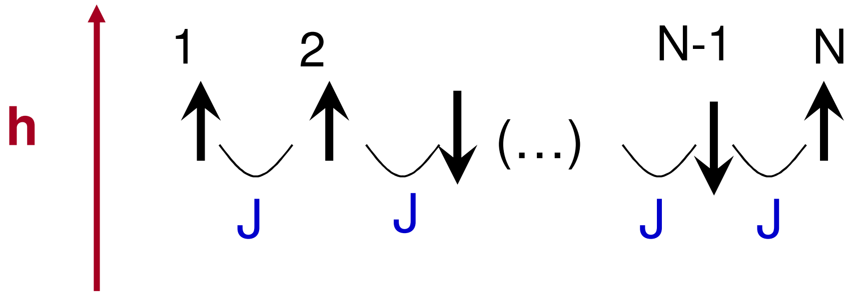


2D:



Modelo de Ising em 1D

Energia (incluindo um campo magnético):



$$E = -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$$

$$\sigma_i = \pm 1$$

Função de partição (sistema em contato com um reservatório térmico):

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \qquad Z(T,h,N) = \sum_k \exp -\beta E_k = \sum_{\{\sigma_1\ldots\sigma_N\}} \exp -\beta E_{\{\sigma_1\ldots\sigma_N\}}$$

Soma é sobre *todas* as configurações de spin possíveis!

$$\{\sigma_1\ldots\sigma_N\} = \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow,\ \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow,\ \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow,\ \ldots$$

Modelo de Ising 1D: Magnetização

Magnetização média por sítio:

$$\langle m\rangle(T,h) = \left\langle \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \right\rangle$$

A *média* é definida por uma soma sobre todas as configurações de spin possíveis:

$$\boxed{\langle m\rangle = \sum_{\alpha=\{\sigma_1\ldots\sigma_N\}} e^{-\beta E_\alpha} m_\alpha}$$

Probabilidade de o sistema estar na configuração α: $P_\alpha = e^{-\beta E_\alpha}$

$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $\quad E_0 = -J(N-1) - hN \quad P_0 = e^{-\beta E_0}$

$\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $\quad E_1 = E_0 + E_{\text{flip}} \quad P_1 = e^{-\beta(E_0+E_{\text{flip}})}$

Tarefa – Parte 1 (arquivo texto/pdf/folha)

Dado que: $$E = -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$$

1) Calcule $E_{flip}=E_1-E_0$ para as seguintes configurações (N=6):

E_0		E_1
$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$	$\longrightarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$
$\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$	$\longrightarrow$	$\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow$
$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$	$\longrightarrow$	$\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow$

2) Em geral: se apenas o k-ésimo spin é flipado, encontre uma expressão para $E_{flip}=E_1-E_0$ em termos de: J, h, σ_{k-1}, σ_k e σ_{k+1} .

Monte Carlo – Cálculo da magnetização

Magnetização média: $$\langle m \rangle = \sum_{\alpha=\{\sigma_1 \ldots \sigma_N\}} e^{-\beta E_\alpha} m_\alpha$$

Queremos fazer a média das magnetizações nas configurações.

$$m_{\alpha=\{\sigma_1 \ldots \sigma_N\}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$$

Podemos acessar todas as configurações através de spin flips partindo de uma inicial.

No entanto, as configuração tem um "peso" diferente.
São privilegiadas as que tem baixo $E/(k_B T)$

$$P_\alpha = e^{-\beta E_\alpha}$$

Monte Carlo – Algoritmo de Metropolis

1) Inicializamos com uma determinada configuração: ↑↓↑↓↑↑

2) Calculamos Eflip para o 1o spin: E_{flip} ↓↓↑↓↑↑

3) Se Eflip<0 flipamos o spin: ↓↓↑↓↑↑

Caso contrário calculamos Pflip (k_B=1) e sorteamos um número r=rand

$$P_{\text{flip}} = e^{-E_{\text{flip}}/T}$$

Se r<Pflip flipamos o spin: ↓↓↑↓↑↑

Caso contrário usamos a configuração original (não flipa spin) ↑↓↑↓↑↑

4) Passamos a um outro spin da cadeia (não necessariamente na sequência).

5) Ao final de cada varredura, calculamos e armazenamos m para a configuração e reiniciamos o processo: $m_{\alpha=\{\sigma_1 \ldots \sigma_N\}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \sigma_i$

6) Após N_{var} varreduras, calcula-se $\langle m \rangle (T)$ usando $\langle m \rangle = \frac{1}{N_{\text{var}}} \sum_{\alpha \in \text{var}} m_\alpha$

Modelo de Ising 1D – Tarefa

Utilize o método de Monte Carlo (algoritimo de Metrópolis) para calcular a magnetização média do modelo de Ising em 1D em função de h

- *Utilize inicialmente uma cadeia com 10 spins e **condições periódicas de contorno**. (o primeio spin é vizinho do último).*
- *Considere que J=1 (esta será a unidade de energia) de modo que:*

$$E(h) = -h\left(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{N-1}\sigma_i\sigma_{i+1}\right) - \sigma_N\sigma_1$$

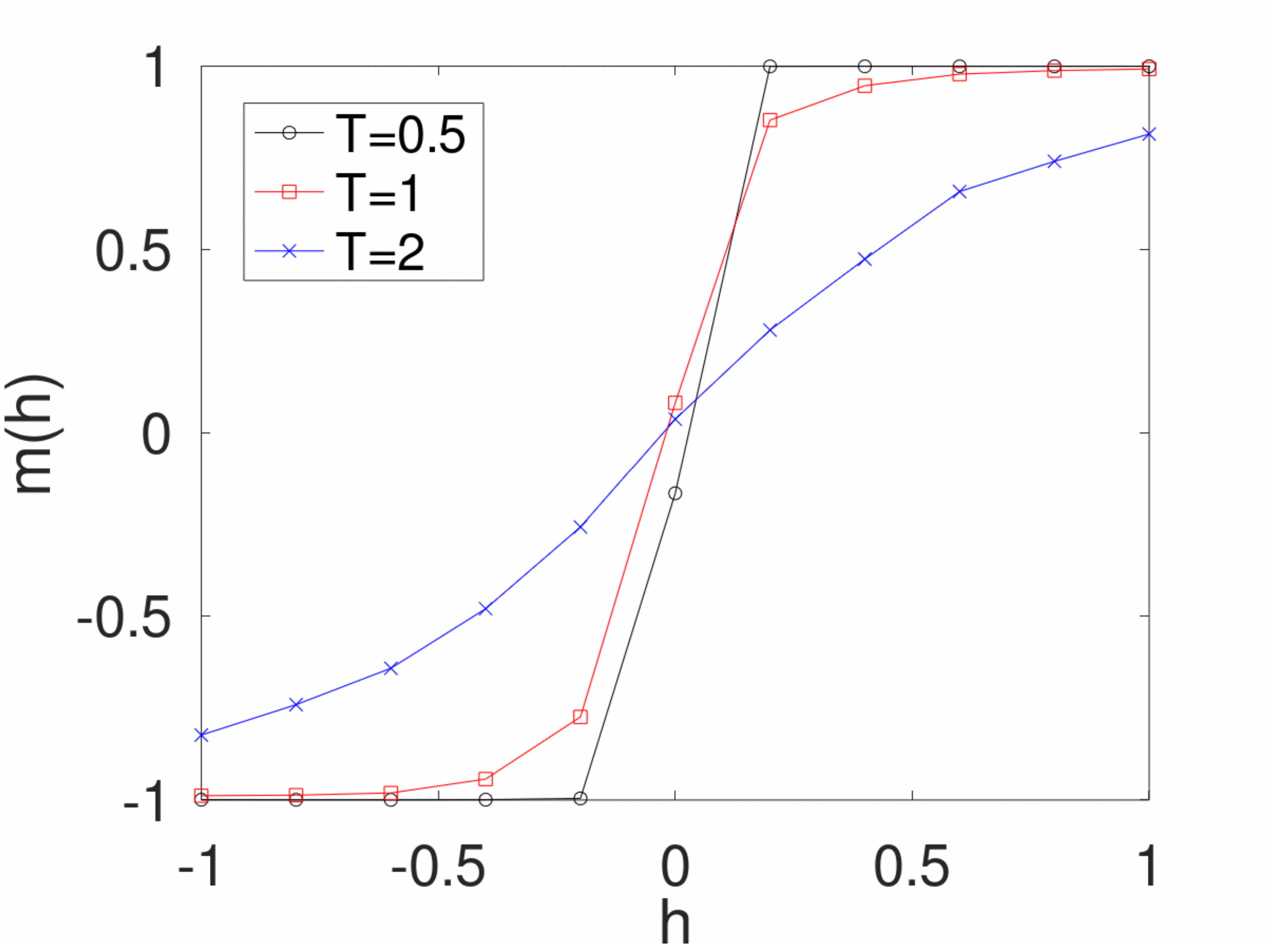
- *Aplique o algoritmo de Metrópolis com 1000 varreduras*

do sistema inteiro para cada valor de temperatura T e campo h.

- *Use T=0.5 , 1 e 2 (*Temp=[0.5 1.0 2.0]*) em unidades onde k_B=1.*
- *Para cada T, faça um gráfico de <m> vs h com* h=-1.0:0.2:1.0.
- *Aumente o tamanho da cadeia para 50 spins. O que acontece?*

Tarefa – Exemplo

- *Exemplo de gráficos <m> vs h para N=10 spins partindo de uma configuração de spins aleatória.*



Modelo de Ising 1D: resultado analítico

Discussão do resultado:

$$m(T,h) = \frac{\sinh \beta h}{\left[\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}\right]^{1/2}}$$

Note que: m(H=0)=0 (independente de T ou J!)

Modelo de Ising em 1D não produz magnetização espontânea!

Argumento qualitativo:
“a entropia sempre ganha
em 1D a T≠0”

$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $\quad E_0 = -NJ/2$

$\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $\quad \Delta E = J \quad \Delta S = k_B \ln N$

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S \qquad N \to \infty \quad \Delta E = J \quad \Delta S \to \infty$$