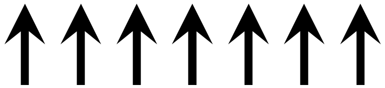
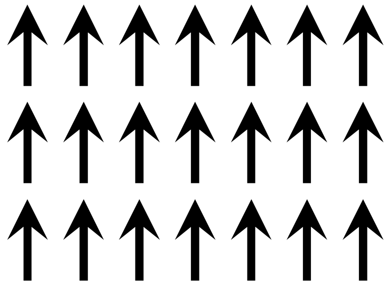
Fases magnéticas.

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

1D:

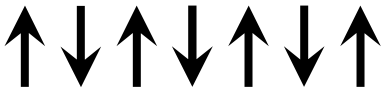


2D:

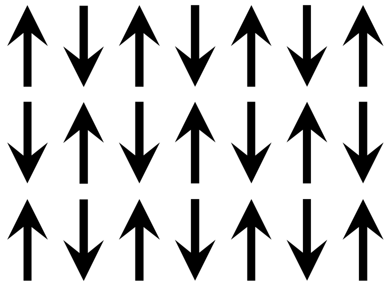


Antiferromagnetismo: spins se alinham alternadamente $\rightarrow$ M=0.

1D:

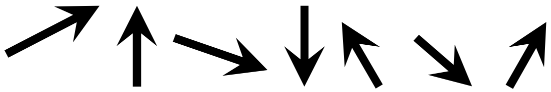


2D:

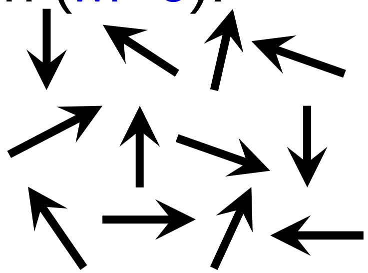


Paramagnetismo: não há ordenamento de spin (M=0).

1D:

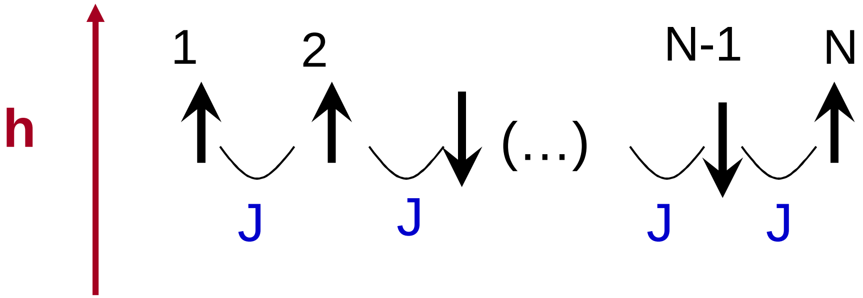


2D:



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):

$$Z(T,h,N) = \sum_k \exp -\beta E_k = \sum_{\{\sigma_1 \dots \sigma_N\}} \exp -\beta E_{\{\sigma_1 \dots \sigma_N\}}$$

Soma sobre *todas* as configurações de spin possíveis!

$$\{\sigma_1 \dots \sigma_N\}$$

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

$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $\quad E_0 = -NJ$ $\qquad P_0 = e^{-\beta E_0}$

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

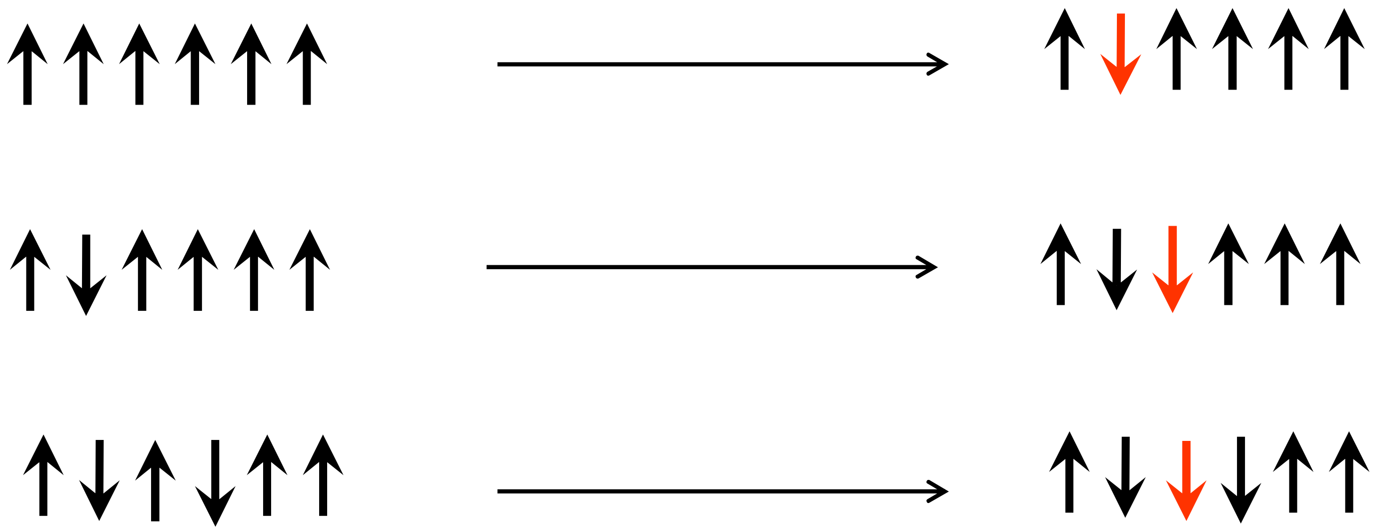
Aula 20 – Tarefa – Parte 1

Dado que:

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

calcule $E_{flip} = E_1 - E_0$ para as seguintes configurações:

E_0 $\qquad\qquad$ E_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

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

Se r<Pflip flipamos o spin: ↓↓↑↓↑↑

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

4) Passamos ao próximo spin da cadeia.

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

$$\langle m\rangle = \frac{1}{N_{\mathrm{var}}}\sum_{\alpha\in\mathrm{var}} m_\alpha$$

Aula 20 – Tarefa (Fazer upload!)

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

- *Utilize inicialmente uma cadeia com 10 spins e* ***condições periódicas de contorno****. (o primeio spin é vizinho do último).*
- *Considere que J=1 e h=0 de modo que a energia é:*

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

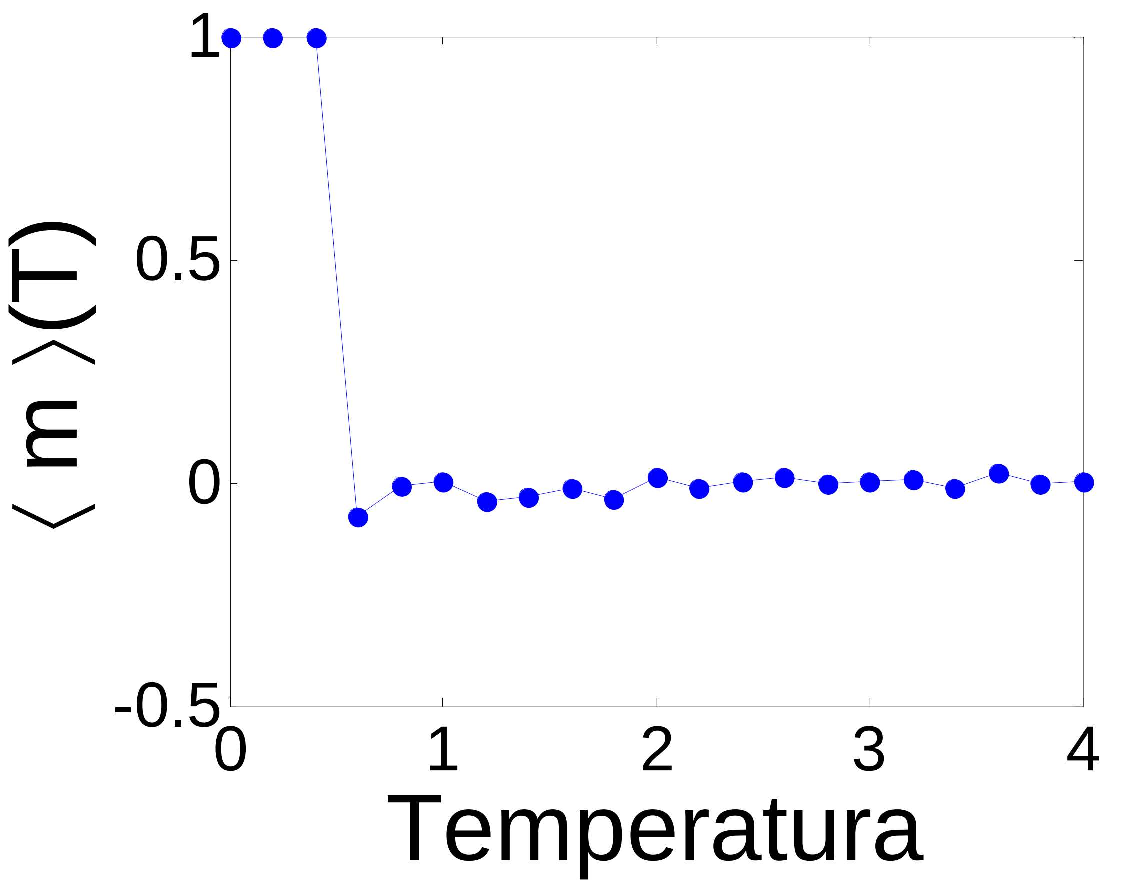
- *Aplique o algoritmo de Metrópolis com 1000 varreduras*

do sistema inteiro para cada valor de temperatura T.

- *Varie a temperatura de 0 a 4 (use k_B=1).*
- *Faça um gráfico de <m> vs T. O que acontece com <m>?*
- *Aumente o tamanho da cadeia para 50 spins. O que acontece?*

Aula 20 – Exemplo

- *Exemplo de gráfico <m> vs T para N=10 spins partindo de uma configuração com todos os spins para cima.*



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"

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

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

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