



## Departamento de Física UNIVERSIDADE DE AVEIRO

### Modelação em Física Estatística

2019.07.2

### Recurso

#### Primeira Parte

1. Pretende-se fazer uma simulação de um gás ideal bidimensional de Fermiões, em que as partículas estão confinadas a um quadrado de lado  $L$ , usando o algoritmo *de Metropolis* no ensemble Canónico (no qual o sistema se encontra a temperatura  $T$  com número de partículas fixo). Os estados de um gás de Fermiões podem ser especificados pelo número de Fermiões,  $n_{\vec{k}}$  que têm um dado vetor de onda,  $k_{x,y} = \frac{\pi}{L} n_{x,y}$  e

$n_{x,y} = 1, 2, \dots, \infty$  com a restrição de que não pode existir mais que uma partícula com um dado vetor de onda

(princípio de exclusão de Pauli). A energia de um Fermião com vetor de onda  $\vec{k}$  é  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  onde  $m$  é a

massa das partículas e  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Use unidade de energia,

$u_E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$  e uma unidade de temperatura,  $u_T = u_E/k_B$ .

**a) (5 valores)** Construa uma função

**function** [Emedio,E2medio, nkmed]=metropolisFermioes(T,nequi,nmedidas,N,nmax) que simula o sistema usando o algoritmo de Metropolis.

**Resolução:** Ver ficheiro metropolisFermioes.m. Embora os resultados sejam independentes do estado inicial, este pode ser considerado como sendo o estado fundamental do gás. A energia dos estados de cada partícula pode ser calculada no vetor ek:

```
for ik=1:nmax*nmax
    nx=mod(ik-1,nmax)+1;ny=floor((ik-1)/nmax)+1;
    ek(ik)=nx*nx+ny*ny;
end
```

Obtemos agora o vetor com as energias em ordem crescente de energia e o vetor de identificação dos estados:

```
[eks,iks]=sort(ek);
```

Ocupamos os estados com uma partícula em ordem crescente de energia:  $nk(iks(1:N))=1$ ;

A energia total inicial do gás é:  $E=\text{sum}(eks(1:N))$ ;

A energia de Fermi é o estado com maior energia ocupado:  $EF=eks(N)$ .

Quando se propõe o movimento de uma partícula para um novo estado é necessário garantir que esse estado está vazio. Assim o novo estado é aceite se:

```
if (rand(1) <= min(1,nv(ik)*(nk(ikv)+1)/(nv(ikv)*nk(ik))*exp(-dE/T)) && nk(ikv)==0 );
    % se for aceite muda-se a partícula para o novo estado
```

```

nk(ikv)=1;
nk(ik)=0;
E=E+dE;
estado_particula(ip)=ikv;
end

```

**b) (5 valores)** Considerando  $n_{\text{equi}}=5000$ ,  $n_{\text{medidas}}=20000$  e  $N=100$  partículas obtenha resultados de simulação para 30 temperaturas entre 3 e 300. Compare os resultados obtidos para  $E_{\text{medio-2N}}$  e para a fugacidade  $z$  (calculada a partir de  $n_{\text{kmedio}}(1)$  usando a relação  $\langle n_1 \rangle = \frac{1}{z^{-1} + 1}$ ) com os valores esperados

das mesmas quantidades para um gás de Fermiões bidimensional ( nas unidades definidas) :

$$\langle E \rangle = -\frac{\pi}{4} T^2 Li_2(1+z) \quad \text{e} \quad 1+z = \exp\left(\frac{4N}{\pi T}\right) \quad \text{onde} \quad Li_2(x) \quad \text{é a função di-logaritmica cujos valores}$$

podem ser obtidos em matlab fazendo `dilog(x)` . Faça gráficos que comparem os valores obtidos com os valores esperados. Calcule também a partir das simulações a capacidade térmica,  $C_V$  , do sistema em função da

temperatura. Faça um gráfico em função da temperatura desta quantidade. Se a função desenvolvida em b) não estiver a funcionar corretamente assuma esta função e faça um script onde faz os cálculos pedidos nesta alínea.

**Resolução:** Ver ficheiro `alinea1b.m`. Comentário: A fugacidade diverge a temperatura zero uma vez que a baixa temperatura o potencial químico,  $\mu$  é igual à energia de Fermi e  $z = \exp(\beta\mu)$  . A temperaturas altas a

energia aumenta linearmente com a temperatura tal como num gás ideal clássico. Neste regime a capacidade térmica é igual a  $N$  ( nas unidades consideradas) .

## Segunda Parte

2.

**a) (1 valor)** A função `listv_rede_triangular(L)` cria uma rede triangular em que cada sítio tem 6 vizinhos, com condições fronteira periódicas:

```

function [lv,nv]=listv_rede_triangular(L)
N=L*L;
lv=zeros(N,6); nv=ones(N,1)*6;

for ix=1:L
    for iy=1:L
        i=ix+(iy-1)*L;
        i1=mod(ix,L)+1+(iy-1)*L; lv(i,1)=i1;
        i2=ix+mod(iy,L)*L; lv(i,2)=i2;
        i3=mod(ix-2,L)+1+mod(iy,L)*L; lv(i,3)=i3;
        i4=mod(ix-2,L)+1+(iy-1)*L; lv(i,4)=i4;
        i5=ix+mod(iy-2,L)*L; lv(i,5)=i5;
        i6=mod(ix,L)+1+mod(iy-2,L)*L; lv(i,6)=i6;
    end
end

```

end

Explique porque as coordenadas (x,y) dos vértices da rede são dadas por  $x=ix+(iy-1)*\cos(\pi/3)$ ;  $y=(iy-1)*\sin(\pi/3)+1$ ; e faça um gráfico dos pontos da rede.

**Resolução:** ver ficheiro alinea2a.m . Os pontos estão sobre retas indexadas por ix e são indexados por iy. Estas retas fazem um ângulo  $\pi/3$  com o eixo dos xx. A coordenada x de um ponto na reta ix indexado por iy é  $x=ix+(iy-1)*\cos(\pi/3)$  dado que os pontos sucessivos sobre a reta estão a uma distância iy-1 do primeiro ponto da reta e

$\frac{(x-ix)}{iy-1} = \cos(\pi/3)$  . As coordenadas y dos pontos da reta ix indexados por iy têm coordenada y dada por

$\frac{(y-1)}{iy-1} = \sin(\pi/3)$  . Deste modo todos os triângulos são equiláteros e têm lado igual a 1.

**b) (3 valores)** Admitindo que os vértices da rede estão presentes com probabilidade  $p$  mostre numericamente, considerando sistemas de tamanho variável  $L=8,16,32$  e  $64$  , diferentes valores de

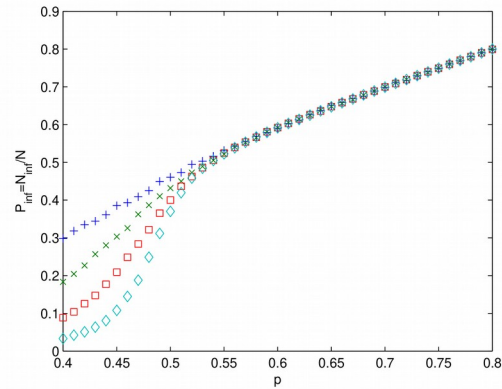
$p=0.4:0.01:0.8$  e 1000 amostras, que os resultados para o parâmetro de ordem  $N_\infty/N$  onde  $N_\infty$  é o

tamanho do maior agregado e N é o número total de vértices da rede são compatíveis com a existência de uma transição de percolação num sistema infinito para um valor de  $p_c=0.5$  .

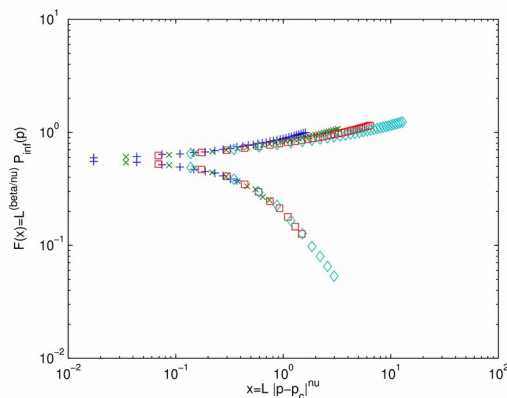
**Resolução:** ver script alinea2b2c.m e função percfunc.m. Usa-se a função agregados.m para determinar os vértices que pertencem a um dado agregado. O output desta função é o vetor label que toma um valor igual em todos os vértices que pertencem a um mesmo agregado. Na função percfunc.m calcula-se o tamanho do maior agregado.:

```
function [Ninf] = percfunc(L, p)
N=L*L; % numero de vertices
[lv,k]=listv_rede_triangular(L); % lista de vizinhos
s=double(rand(N,1)<p); % ocupa sistios com probabilidade p
[ label] = agregados( lv,k,s ); % determina os labels de cada sitio
labuni=unique(label); % determina os labels diferentes existentes
nagr=length(labuni); % nagr e' o numero de agregados +1 ( dado 0 ser tambem label)
tamanho=zeros(nagr,1);
for agregado=1:nagr % calcula o tamanho de cada agregado
    if (labuni(agregado)>0) % e necessario excluir o 0 que e' o label de vertices nao ocupados
        tamanho(agregado)=sum(label==labuni(agregado));
    end
end
Ninf=max(tamanho); % calcula o tamanho maior
end
```

A quantidade  $P_\infty=N_\infty/N$  (parâmetro de ordem da transição) anula-se para  $p<p_c=0.5$  e tende para um valor constante quando  $p>p_c$  , quando  $N \rightarrow \infty$  . Num sistema finito observam-se valores não nulos para  $p<p_c$  mas que se tornam cada vez menores à medida que o tamanho do sistema aumenta.

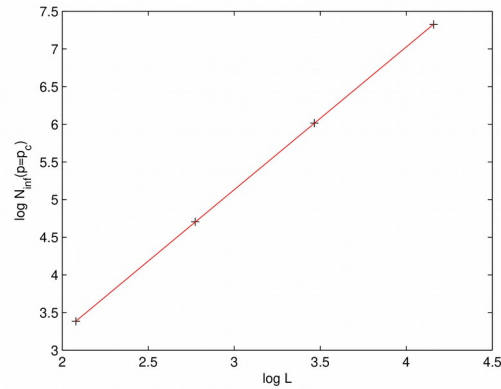


Para melhor verificar que os resultados são compatíveis com um ponto crítico para  $p_c = 0.5$  podemos fazer um gráfico de escalonamento da função  $F(x) = L^{\beta/\nu} P_\infty(p)$  em função de  $x = L|p - p_c|^\nu$  com  $p_c = 0.5$ ,  $\beta = 5/36$  e  $\nu = 4/3$ . O colapso dos pontos sobre uma mesma curva indica que estamos perante um ponto crítico de percolação a duas dimensões:



c) (3 valores) Faça um gráfico do número de vértices que pertencem ao maior agregado presente no sistema,  $N_\infty$  para  $p_c = 0.5$  em função do tamanho do lado do sistema,  $L$ , em escala log-log e determine deste modo a dimensão fractal dos agregados,  $d_f$ . Represente o ajuste no mesmo gráfico.

**Resolução:** ver script alinea2b2c.m. Seleccionam-se os valores de  $N_\infty$  para  $p_c = 0.5$  e faz-se o gráfico em escala log-log de  $N_\infty$  em função de  $L$ . O declive do gráfico dá-nos a dimensão fractal  $d_f = 1.894357$  e o valor esperado é  $d_f = 91/48 = 1.895833 \dots$



**d) (3 valores)** Explique justificando porque se espera que, para sistemas muito grandes,  $d_f = 91/48 < 2$ .

**Resolução:** Para  $p = p_c$  o agregado infinito é fractal com um comprimento de correlação,  $\xi$  divergente.

Suponhamos  $p$  ligeiramente maior que  $p_c$ . Numa região de comprimento  $\xi$  temos  $N_\infty \sim \xi^{d_f}$  vértices

pertencentes ao agregado infinito, por definição de dimensão fractal. Como  $\frac{N_\infty}{N} \sim \frac{\xi^{d_f}}{\xi^d}$  uma vez que nessa

região comprimento  $\xi$  existem  $\xi^d$  vértices dos quais  $\xi^{d_f}$  estão ocupados. Dado  $\xi \sim (p - p_c)^{-\nu}$

temos  $\frac{N_\infty}{N} \sim (p - p_c)^{(d - d_f)\nu}$ . Como  $\frac{N_\infty}{N} \sim (p - p_c)^\beta$ , devemos ter,  $\beta = (d - d_f)\nu$  e portanto,

$d_f = d - \frac{\beta}{\nu} < 2$ . Como  $\beta = 5/36$  e  $\nu = 4/3$  para percolação a duas dimensões, temos

$$d_f = 91/48 = 1.895833...$$

Num sistema finito o comprimento de correlação está limitado pelo tamanho do sistema  $L$  e para  $p = p_c$

podemos considerar  $\xi \sim L$  sendo válida a relação  $N_\infty \sim L^{d_f}$ .