



Departamento de Física UNIVERSIDADE DE AVEIRO

Modelação em Física Estatística

2019.06.13

Exame

Primeira Parte

1. Pretende-se fazer uma simulação de um gás ideal bidimensional de Bosões, 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 Bosões podem ser especificados pelo número de Bosões, $n_{\vec{k}}$ que têm um dado vetor de onda, $k_{x,y} = \frac{\pi}{L} n_{x,y}$ e

$n_{x,y} = 1, 2, \dots, \infty$. A energia de um Bosão 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 2π . A simulação é feita escolhendo partículas

com um dado vetor de onda \vec{k} e movendo essas partículas para um valor de \vec{k} vizinho próximo de maneira a

que as variações de energia sejam pequenas e respeitando *detailed balance* relativamente à distribuição de probabilidade estacionária dos estados do sistema. Os números quânticos $1 \leq n_x \leq n_{max}$ e $1 \leq n_y \leq n_{max}$

constituem uma rede quadrada com tamanho máximo de rede $n_{max} = 50$ e sem condições fronteira periódicas.

Pode usar-se um índice para especificar um dado valor de \vec{k} , $i_k = n_x + n_{max}(n_y - 1)$ em lugar dos dois

índices n_x e n_y . Por outro lado, dado i_k , podemos obter os números quânticos n_x e n_y fazendo,

$$n_x = \text{mod}(i_k - 1, n_{max}) + 1 \quad \text{e} \quad n_y = \text{floor}((i_k - 1)/n_{max}) + 1; \quad . \text{ Use unidade de energia, } u_E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \text{ e}$$

uma unidade de temperatura, $u_T = u_E/k_B$.

a) (6 valores) Construa uma função

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

(1) Inicialize todas as N partículas no estado $i_k = 1$. Use o vetor n_k de dimensão n_{max}^2 para registar

o estado do sistema (número de partículas com vetor de onda \vec{k}). Use um vetor auxiliar de dimensão

N, `estado_particula`, que regista o estado em que se encontra cada partícula. Inicialmente todas as partículas estão no estado 1. A energia inicial do sistema é $E = 2N$.

(2) Para um total de `npassos=nequi+nmedidas` com `nequi` igual ao número de passos para equilibrar e `nmedidas` igual ao número de passos para cálculo de médias temporais atualiza-se o estado do sistema N vezes em cada passo:

2a) Escolhe-se uma partícula `ip`, ao acaso do vetor `estado_particula`. Suponha que essa partícula se encontra no estado `ik`.

2b) Propõe-se o movimento dessa partícula para um estado vizinho na rede quadrada de estados escolhendo um vizinho ao acaso e identificando o índice desse estado (use a função `function [lv,nv]=listv_sem_cfp(nmax)` desenvolvida para o problema de percolação). Seja esse estado vizinho o estado `ikv`. Calcula-se a variação de energia dE .

2c) Aceita-se o movimento da partícula com probabilidade:

$$p_A = \min\left(1, \frac{nv(ik)(nk(ikv)+1)}{nv(ikv)nk(ik)} \exp(-dE/T)\right)$$

2d) Caso seja aceite atualizam-se as variáveis $E = E + dE$, $nk(ik) = nk(ik) - 1$, $nk(ikv) = nk(ikv) + 1$, `estado_particula(ip)=ikv`.

2e) Se o passo for maior que `nequi` fazem-se médias da energia na variável `Emedio`, do quadrado da energia na variável `E2medio` e do vetor `nk` na variável `nkmedio`.

Resolução: Ver ficheiro `metropolis.m`

b) (3 valores) Considerando `nequi=5000`, `nmedidas=20000` e `N=100` partículas obtenha resultados de simulação para 30 temperaturas entre 3 e 300. Compare os resultados obtidos para `Emedio-2N` e para a fugacidade z (calculada a partir de `nkmedio(1)` usando a relação $\langle n_1 \rangle = \frac{1}{z^{-1} - 1}$) com os valores esperados

para um gás de Bosões bidimensional (nas unidades definidas) : $\langle E \rangle = \frac{\pi}{4} T^2 Li_2(1-z)$ e

$$1-z = \exp\left(-\frac{4N}{\pi T}\right) \quad \text{onde } Li_2(x) \text{ é a função di-logaritmica cujos valores podem ser obtidos em matlab}$$

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`

c) (3 valores) Mostre analiticamente, usando a condição de equilíbrio detalhado, que a probabilidade de aceitar uma proposta definida acima garante que a distribuição estacionária de energia vem dada por $P_{est}(\{n_k\}) \sim \exp(-\beta E(\{n_k\}))$ como é esperado para um gás ideal de partículas indiscerníveis. Mostre ainda

que se usar,

$$p_A = \min\left(1, \frac{nv(ik)}{nv(ikv)} \exp(-dE/T)\right),$$

a distribuição estacionária vem dada por $P_{est}(\{n_k\}) \sim \frac{\exp(-\beta E(\{n_k\}))}{\prod_k n_k!}$ como se espera para partículas

discerníveis. Tenha em atenção que escolher uma partícula ao acaso é equivalente a escolher um vetor \vec{k} com probabilidade proporcional ao número de partículas que têm esse vetor \vec{k} , isto é n_k .

Resolução:

A probabilidade de aceitar uma configuração x' a partir de uma configuração x obedecendo a *detailed balance* relativamente à distribuição de probabilidade estacionária $P_{est}(x)$, é:

$$p_A = \min\left(1, \frac{Q(x, x')}{Q(x', x)} \frac{P_{est}(x')}{P_{est}(x)}\right)$$

onde $Q(x, x')$ é a probabilidade de propor x a partir de x' . No caso em análise, temos $x \equiv n_k$ e $x' \equiv n'_k$ onde n_k é igual a n'_k excepto num estado i_k e noutro i_{k_v} em que $n'_k(i_k) = n_k(i_k) - 1$ e $n'_k(i_{k_v}) = n_k(i_{k_v}) + 1$.

Tendo em atenção que a probabilidade de seleccionar um i_k e de escolher um i_{k_v} é

$$Q(n'_k, n_k) = \frac{n_k(i_k)}{N n_v(i_{k_v})}$$
 e que a probabilidade estacionária para um sistema de partículas indiscerníveis é

$$P_{est}(\{n_k\}) = \exp(-\beta E(\{n_k\})) / Z, \text{ temos:}$$

$$p_A = \min\left(1, \frac{n'_k(i_{k_v}) n_v(i_k)}{n_k(i_k) n_v(i_{k_v})} \exp(-dE/T)\right),$$

com $dE = E(n'_k) - E(n_k)$, representando a variação de energia quando a partícula mudou de estado.

Se $P_{est}(\{n_k\}) \sim \frac{\exp(-\beta E(\{n_k\}))}{\prod_k n_k!}$, temos que $\frac{P_{est}(\{n'_k\})}{P_{est}(\{n_k\})} = \frac{n_k(i_k)! n_{k_v}(i_{k_v})!}{n'_k(i_k)! n'_k(i_{k_v})!} \exp(-\beta dE)$. Dado

que $n'_k(i_k) = n_k(i_k) - 1$ e $n'_k(i_{k_v}) = n_k(i_{k_v}) + 1$ a expressão pode simplificar-se para

$$\frac{P_{est}(\{n'_k\})}{P_{est}(\{n_k\})} = \frac{n_k(i_k)}{n'_k(i_{k_v})} \exp(-dE/T). \text{ Como } Q(n'_k, n_k) \text{ tem o mesmo valor que no caso anterior a}$$

expressão da probabilidade de aceitação simplifica-se para:

$$p_A = \min\left(1, \frac{n_v(i_k)}{n_v(i_{k_v})} \exp(-dE/T)\right)$$

Segunda Parte

2.

a) (4 valores) Explicando e justificando todos os passos mostre que uma teoria de campo médio para o modelo Ising prevê uma transição de fase contínua com um expoente $\beta_{cm}=1/2$ e $\gamma_{cm}=1$.

Resolução:

A energia do modelo Ising numa rede de spins escreve-se, $E = -J \sum_{(i,j)} s_i s_j - H \sum_i s_i$ onde a soma sobre

(i, j) representa uma soma sobre todos os pares de spins vizinhos na rede, com spins s_i e s_j , que tomam

valores +1 ou -1, J representa uma constante de acoplamento de spins e H representa um campo magnético externo. Uma teoria de campo médio despreza flutuações dos spins e pode ser obtida substituindo o efeito dos spins vizinhos sobre um dado spin por um campo magnético efetivo $H_{ef} = H + Jz m$ onde z é o número de vizinhos de cada

sítio e m é a magnetização média por spin, $m = \frac{1}{N} \sum_i \langle s_i \rangle = \langle s_i \rangle$ onde N é o número de spins (dado que todos

os valores médios são iguais). Considerando um campo efetivo o problema reduz-se a um problema de spins independentes com energia $E = -H_{ef} \sum_i s_i$ cuja função de partição pode ser facilmente calculada,

$$Z = \sum_{s_1} \dots \sum_{s_N} \exp(-\beta H_{ef} \sum_i s_i) = [2 \cosh(\beta H_{ef})]^N. \text{ Tendo em atenção que a magnetização média vem}$$

dada por definição por $m = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial}{\partial H_{ef}} \ln Z \right)_T = \tanh(\beta H_{ef})$. Substituindo nesta expressão

$H_{ef} = H + Jz m$ e considerando o caso $H=0$, temos $m = \tanh(\beta z J m)$. Para valores de m pequenos podemos expandir a tangente hiperbólica, $\tanh(x) \sim x - x^3/3$. Substituindo temos

$$m = \beta z J m - (\beta z J m)^3/3 \text{ que tem uma solução } m=0 \text{ e uma solução não nula } 1 = \beta z J - (\beta z J)^3 m^2/3 \text{ que}$$

só existe se $1 < \beta z J$ ou seja $T < T_c = \frac{zJ}{k_B}$. Esta solução pode escrever-se como $m = \sqrt{3 \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right)}$

que se anula para T_c com um expoente $m \sim (T_c - T)^{\beta_{cm}}$, $\beta_{cm} = 1/2$.

Para obter o comportamento da susceptibilidade temos que usar $m = \tanh(\beta H_{ef})$ em campo externo não nulo

e calcular $\chi = N \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_{T, H=0}$. Dado que a derivada da tangente hiperbólica é a secante hiperbólica ao quadrado

temos $\frac{\partial m}{\partial H} = \frac{(\beta z J \frac{\partial m}{\partial H} + \beta)}{\text{sech}^2(\beta H_{ef})}$. Para obter a susceptibilidade temos que calcular o limite em que $H=0$ obtendo

$\chi/N = \frac{(\beta z J \chi / N + \beta)}{\text{sech}^2(\beta z J m)}$. No caso $T > T_c$, temos $m=0$, e podemos facilmente resolver a equação anterior

para χ (dado que $\text{sech}(0)=1$) obtendo $\chi = \beta(zJ\chi + N)$ ou seja $\chi(1 - \frac{T_c}{T}) = \frac{N}{k_B T}$ ou ainda

$\chi = \frac{N}{k_B(T - T_c)}$. Daqui concluímos que a susceptibilidade tem o comportamento $\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma_{cm}}$ com

$$\gamma_{cm} = 1 \text{ .}$$

b) (4 valores) Explicando e justificando todos os passos mostre que, para a percolação de sítios na árvore de Cayley, com z arestas emanando de cada vértice, o número de agregados finitos de tamanho s por vértice da árvore se pode escrever na forma $n_s(p) = n_s(p_c) \exp(-|p - p_c|^{1/\sigma} s)$ onde p é a probabilidade de um vértice estar

ocupado , $p_c = \frac{1}{z-1}$ é a probabilidade crítica para observar um agregado infinito e $\sigma = 1/2$.

Resolução:

Consideramos percolação por sítios, onde p é a probabilidade de um sítio estar ocupado. Um agregado de tamanho s na árvore de Cayley com z ligações em cada sítio, tem um número de sítios do perímetro, isto é o número de sítios que não pertencem ao agregado mas são vizinhos de sítios do agregado, $t(s)$, dependente do tamanho s de acordo com a expressão $t(s) = z - 2 + t(s-1)$. Este resultado resulta de que sempre que se adiciona um sítio ao

agregado o número de sítios do perímetro aumenta em $z-2$ ao eliminarmos um sítio do perímetro e adicionamos $z-1$ novos sítios. Tendo em atenção que $t(1)=z$, $t(2)=z+(z-2)$, $t(3)=z+2(z-2)$ chegamos à expressão geral $t(s) = z + (s-1)(z-2)$.

Um sítio na origem está ligado a um sítio a um numero de passos l se existir um caminho de sítios ocupados entre os dois sítios, com probabilidade p^l . Como há cerca de $(z-1)^l$ sítios à distância l da origem a probabilidade de

haver um agregado infinito é proporcional a $(p(z-1))^l$. Quando $(p(z-1))^l \rightarrow 0$ não existe agregado infinito, ou seja quando $p < p_c = 1/(z-1)$.

Para se ter um agregado de tamanho s , os sítios do agregado devem estar ocupados e os sítios do perímetro não devem estar ocupados. A probabilidade disso acontecer é $p^s(1-p)^{t(s)}$. Todos os agregados de tamanho s têm

esta probabilidade de acontecer. Então o número médio de agregados de tamanho s por sítio da árvore deve poder escrever-se:

$$n_s(p) = g_s p^s (1-p)^{t(s)} = g_s (1-p)^2 p^s (1-p)^{s(z-2)} = g_s (1-p)^2 \exp(s \ln(p(1-p)^{z-2})) \text{ ,}$$

onde g_s é um factor que não depende de p . Pode então escrever-se $n_s = n_s(p_c) \exp(-c s)$, com

$$c = -\ln\left(\frac{p}{p_c} \left(\frac{1-p}{1-p_c}\right)^{(z-2)}\right) \quad \text{onde } p_c \text{ é a probabilidade crítica de percolação. E } c=0 \text{ quando } p=p_c.$$

Expandindo o logaritmo próximo de $x=1$ temos $\ln(1+x) \sim x$. Então $c = -\ln\left(1 + \frac{p}{p_c} \left(\frac{1-p}{1-p_c}\right)^{(z-2)} - 1\right)$

ou $c \sim 1 - \frac{p}{p_c} \left(\frac{1-p}{1-p_c}\right)^{(z-2)}$. Tendo em atenção que $(1+x)^{(z-2)} \sim 1 + (z-2)x$ para $x \ll 1$ e

escrevendo $c \sim 1 - \frac{p}{p_c} \left(1 + \frac{1-p}{1-p_c} - 1\right)^{(z-2)}$ obtemos $c \sim 1 - \frac{p}{p_c} \left(1 + (z-2)\left(\frac{1-p}{1-p_c} - 1\right)\right)$. Esta

expressão simplifica-se para

$$c \sim \frac{p_c(1-p_c) - p(1-p_c + (z-2)(p_c - p))}{p_c(1-p_c)} \quad \text{ou} \quad c \sim \frac{(p_c - p)(1-p_c - p(z-2))}{p_c(1-p_c)}. \quad \text{Como}$$

$$p_c = 1/(z-1) \quad \text{temos} \quad 1-p_c = (z-2)p_c \quad \text{e obtemos} \quad c \sim \frac{(z-2)(p_c - p)^2}{p_c(1-p_c)}.$$

Ou seja, verifica-se $n_s(p) = n_s(p_c) \exp(-|p-p_c|^{1/\sigma} s)$ com $\sigma = 1/2$.