Exercício 5 – Modelo de Ising

Cláudio Santos nº 42208 MIEF

claudiostb7@hotmail.com

Sumário: Implementação do Modelo de Ising por simulações de Monte Carlo (método de Metropolis). Cálculo da energia média e magnetização média para diferentes tamanhos de sistemas. Estimação da temperatura crítica T_c.

No modelo de Ising ferromagnético, a energia total **E** de uma configuração é:

$$E = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \, \sigma_j \tag{1}$$

onde a soma é sobre todos os pares vizinhos de spin, $\boldsymbol{\sigma_i}$ é o estado do spin **i** e **J** é a interação de troca. A magnetização **M** do sistema é:

$$M = \sum_i \sigma_i \tag{2}$$

A variação de energia **ΔE** associada à inversão de um spin **i** é, pela equação (1):

$$\Delta E = -J\sigma_i^{final} \sum_j \sigma_j + J\sigma_i^{inicial} \sum_j \sigma_j$$

$$\Delta E = 2J\sigma_i^{inicial} \sum_j \sigma_j \tag{3}$$

Ao longo de todo este relatório considerou-se **J=1** e para o cálculo de **ΔE** apenas se somou o estado de spin associado aos primeiros viznhos.

Exercício 5.1

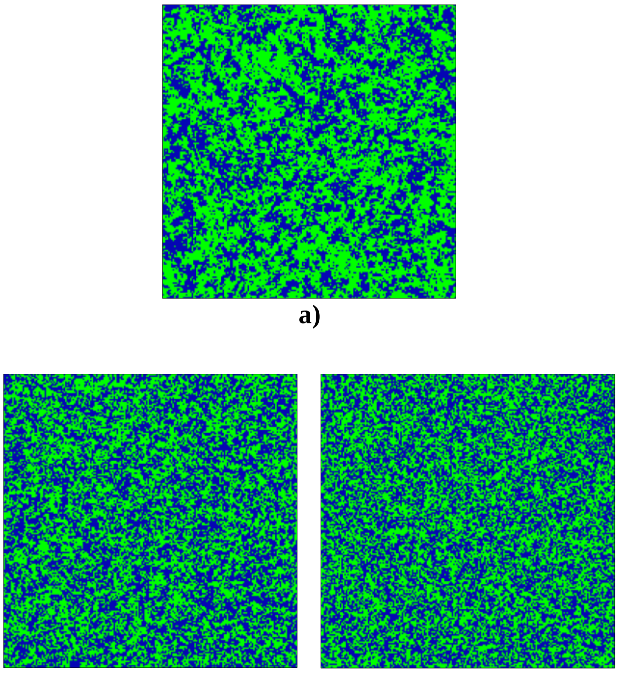
O objectivo deste exercício foi aplicar o algoritmo de Metropolis ao modelo de Ising e gerar imagens do sistema para diferentes temperaturas de equilíbrio. O algoritmo consiste em escolher aleatóriamente um spin da configuração e calcular a variação de energia **ΔE** associada à inversão desse spin. Se esta variação for negativa, o spin inverte e actualiza-se a energia e magnetização do sistema. Se a variação for positiva, o spin tem uma probabilidade **p** de inverter dada por:

$$p = e^{\frac{-\Delta E}{k_B T}} \tag{4}$$

onde $\mathbf{k_B}$ é a constante de Boltzman e **T** a temperatura. Se o spin inverter desta maneira, também se actualiza energia e magnetização. Este procedimento é repetido até o sistema ficar em equilíbrio, ou seja, num estado de menor de energia. Cada iteração tem o nome de Monte Carlo step.

No código definiu-se uma função **ising** que tem como argumentos de entrada os lados **Lx** e **Ly** da rede quadr ada, o número **N** de Monte Carlo steps e a temperatura **T**. Considerou-se **Lx=Ly=200** e $\mathbf{N=10^6}$. Dentro da função começou-se por definir todos os spins da rede com o estado ‘1’ (up). A magnetização inicial é **M=Lx Ly**. Para calcular a energia inicial do sistema, correu-se o sistema todo com um duplo ciclo e aplicou-se a equação (1). Na parte do somatório de dos primeiros vizinhos, impôs-se condições de fronteira periódicas e, feita a soma toda, dividiu-se por dois pois conta-se cada par de vizinhos duas vezes. Depois foi aplicar o algoritmo de Metropolis (também com condições de fronteira periódicas na verificação dos vizinhos). Para verificar a a condição se o spin inverte ou não, comparou-se a probabilidade **p** da equação (4) com um número aleatório **w** e inverte se **p** for maior que **w**. Quando se actualiza a energia, soma-se ao valor anterior **E** da energia o valor da variação **ΔE** de inversão de spin. No caso de actualizar a magnetização **M**, se o spin inverte de ‘1’ para ‘-1’ (up para down), a magnetização diminui de um valor de dois. No outro caso de inversão de ‘-1’ para ‘1’ (down para up), a magnetização aumenta de um valor de dois.

Feito o algoritmo, guardou-se a imagem do sistema com o código “latticeview.h”. Foram geradas imagens para T=1,2,…,10. Observou-se que para T=1, o sistema permanence com os estados todos ‘1’ e só a partir de T=3 se nota significativamente os estados de spin a inverterem de modo a minimizarem a energia.



a) **b)** **c)**

Figura 1- Rede quadrada de lado L=200, onde cor verde significa estado ‘1’ (up) e azul estado ‘-1’ (down) a uma temperatura: a) T=3, b) T=5, c) T=9.

Exercício 5.2

O objectivo do exercío é calcular a energia média **<E>** e a magnetização média **<M>** em função da temperatura **T**. De modo a diminuir a correlação entre amostras, para cada temperatura, foi feito a média sobre várias amostras a cada três Monte Carlo sweeps. Um Monte Carlo sweep é definido como o número de spins do sistema. Enquanto se varre as temperaturas (da mais baixa para a mais alta), usa-se sempre a configuração final da temperatura anterior como ponto de partida para a nova temperatura.

No código, aproveitou-se a função usada no exercício anterior e acrescentou-se mais três argumentos de entrada: o número de Monte Carlo step sobre quais são recolhidas amostras **sweep**, a temperatura final **Tf** e o incremento da temperatura **dT**. Pôs-se a parte do código referente ao algoritmo de Metropolis dentro de um ciclo que corre as temperaturas entre **Tf** e **Ti** em passos de **dT**. Sempre que a divisão de um Monte Carlo step pelo número **sweep** der resto zero, mede-se a energia e a magnetização. Após todos os steps **N**, é feito uma média sobre **E** e **M** pelo número de vezes em que se recolheram dados.

Do exercício anterior, notou-se que existe uma temperatura crítica **Tc** situada entre 1 e 5. Por isso, fez-se **Ti=1.0** e **Tf=5.0** de modo a poder estimar **Tc**. Os tamanhos de sistema escolhidos foram **L=10**, **L=30** e **L=90.** Por isso a iteração para a média **<E>** e **<M>** é **sweep=300**, **sweep=2700** e **sweep=24300**, respectivamente. O número total de Monte Carlo steps para todos os sistemas continua a ser **N=10⁶**.

Para estimar a temperatura crítica, observou-se o gráfico da magnetização média em função da temperatura e considerou-se que é o valor quando a curva fica descontínua. Analogamente, nos gráficos da energia média em função da temperatura a temperatura crítica estima-se pelo ponto em que a concavidade da curva altera de sinal.

Optou-se pelo primeiro caso por ser mais fácil de medir. Fez-se por isso uma média do valor obtido para cada tamanho de sistema e obteve-se assim o valor de **Tc=2.167** para a temperatura crítica. Este resultado, comparando com o valor téorico de **Tk** dado por:

$$T_k = \frac{2}{ln\left(1+\sqrt{2}\right)} \simeq 2{,}2691\ldots$$

obtem-se um desvio relativo de cerca de 5%.

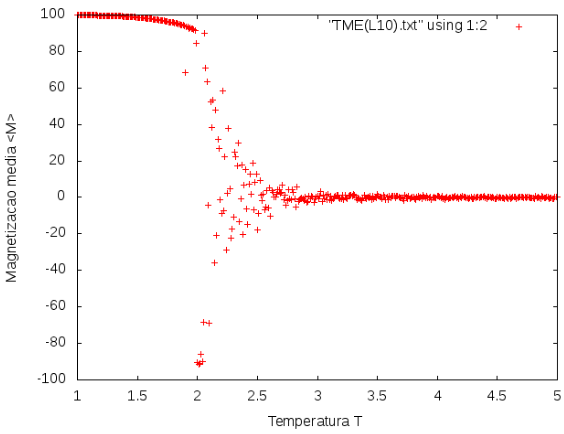


Figura 2- Magnetização média <M> em função da temperatura T para uma rede quadrada de lado 10. Monte Carlos steps N=10^6, sweep=300. A curva fica descontinua aproximadamente a Tc=2.0.

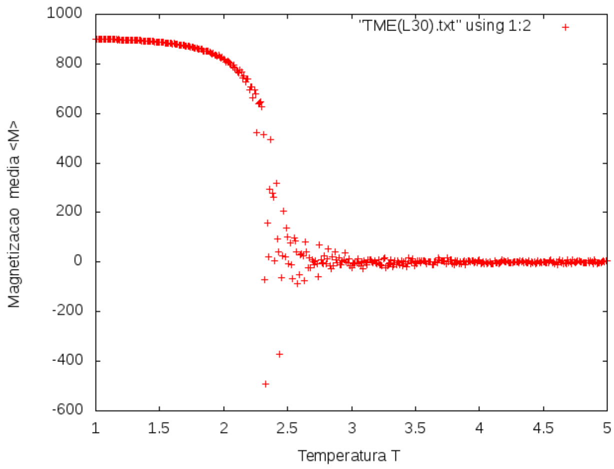


Figura 3- Magnetização média <M> em função da temperatura T para uma rede quadrada de lado 30. Monte Carlos steps N=10^6, sweep=2700. A curva fica descontinua aproximadamente a Tc=2.3.

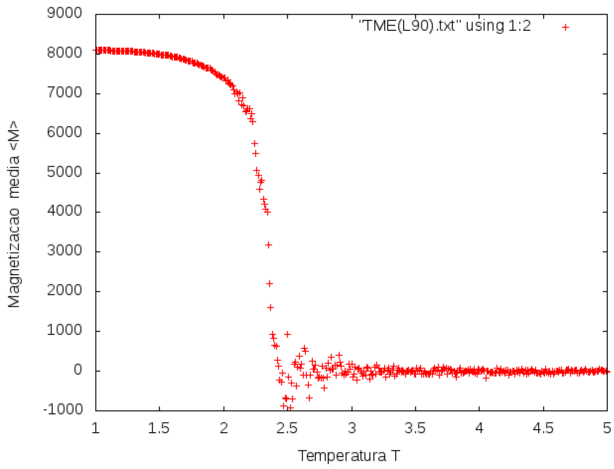


Figura 4- Magnetização média <M> em função da temperatura T para uma rede quadrada de lado 90. Monte Carlos steps N=10^6, sweep=24300. A curva fica descontinua aproximadamente a Tc=2.2.

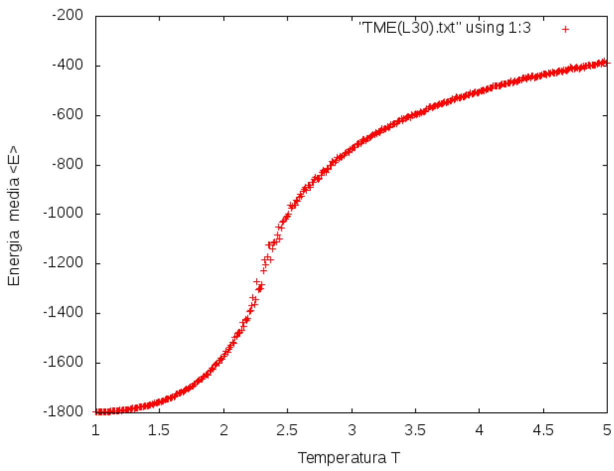


Figura 5- Energia média <E> em função da temperatura T para uma rede quadrada de lado 30. Monte Carlo steps N=10^6, sweep=2700. A curva para os outros tamanhos de sistema é semelhante e observa-se a mudança de concavidade a Tc=2,3.