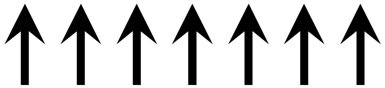
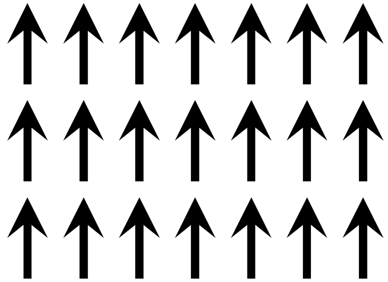
# Fases magnéticas.

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

1D:

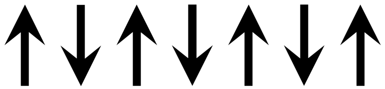


2D:

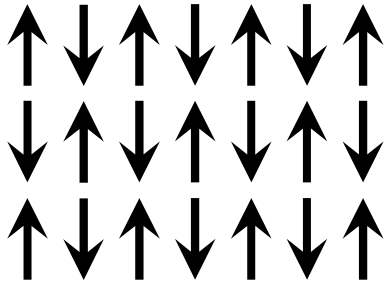


**Antiferromagnetismo**: spins se alinham alternadamente $\rightarrow$ M=0.

1D:

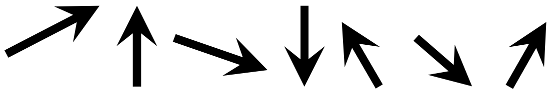


2D:

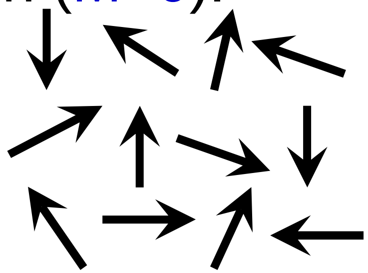


**Paramagnetismo**: não há ordenamento de spin (M=0).

1D:

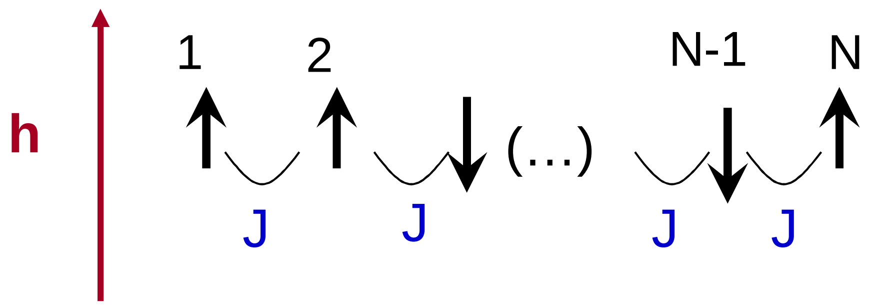


2D:



# 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):**

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

Soma sobre *todas* as configurações de spin possíveis!

$$\{\sigma_1 \ldots \sigma_N\}$$

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

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

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

# Aula 20 – Tarefa – Parte 1 (na folha!)

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

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, $\sigma_{k-1}$, $\sigma_k$ e $\sigma_{k+1}$ .

# 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: $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$

2) Calculamos Eflip para o 1o spin: $E_{\text{flip}}$ $\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$

3) Se Eflip<0 flipamos o spin: $\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$

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: $\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$

Caso contrário usamos a configuração original (não flipa spin) $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$

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

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

# 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:*

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

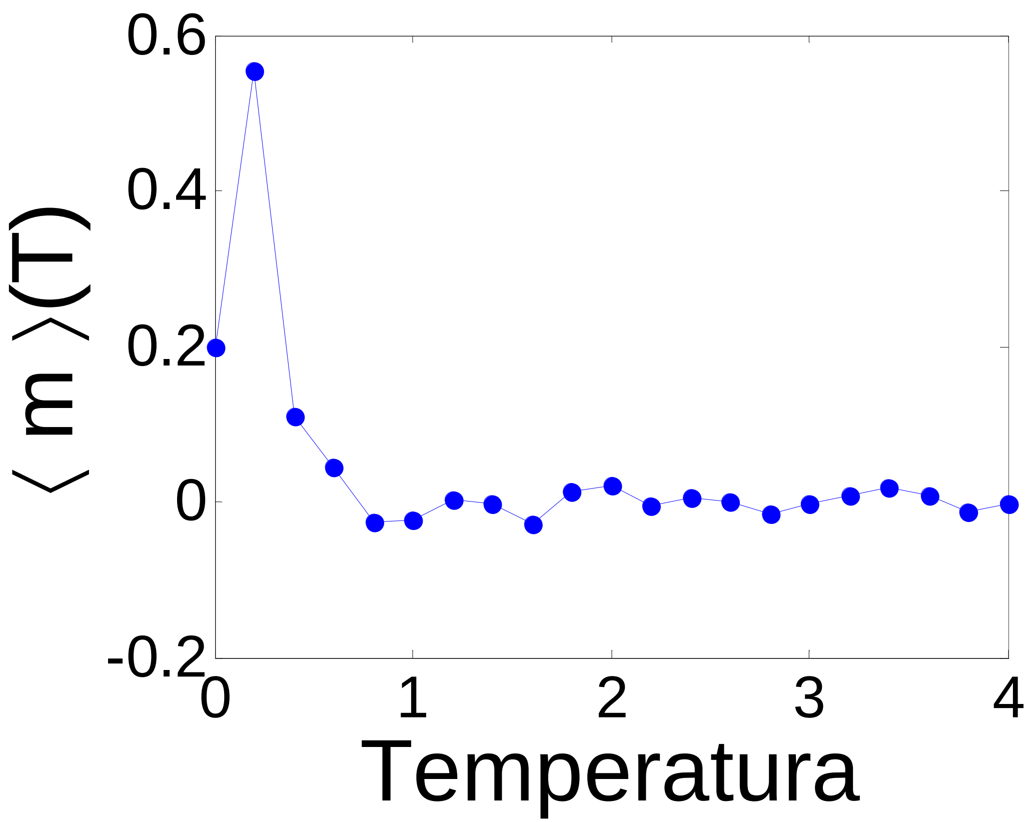
- *Aplique o algoritmo de Metrópolis com 1000 varreduras*

*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 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”

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

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

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