Física Estatística

Ano lectivo 2023/2024

TPC3 - Modelo de Ising de dimensão infinita com anisotropia

Atenção:

- Não deve escrever o seu nome nem nenhum código identificador em nenhum sítio.
- Deve entregar ESTE Notebook de Jupyter.
- O trabalho é individual. Podem e devem haver discussões com colegas mas o resultado entregue é individual.
- Não deve acrescentar ou apagar nenhuma célula.
- Todas as explicações devem ser claras e concisas.
- É preferível fazer menos e fazer bem que muito e mal.
- A não verificação de alguma destas regras leva ao anulamento e exclusão da prova.

1. Exercício

Nas aulas discutimos a solução do modelo de Ising de campo médio com N spins ($s = \pm 1/2$). Neste trabalho de casa vamos abordar o modelo de Ising de campo médio de spin um ($s_i = \pm 1, 0$) com anisotropia. Considere o Hamiltoniano,

$$H(M, N_0, N) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(1 - s_i s_j) + D\sum_{i=1}^{N} s_i^2 = \frac{N^2 - M^2}{N} + D(N - N_0)$$

onde a magnetização é dada por $M = \sum_{i=1}^{N} s_i$ e as variáveis de spin s_i são $\{\pm 1\}$. Para este modelo a energia é função apenas da magnetização e do número de partículas. A densidade de estados do sistema é obtida usando o número de spins $s_i = +1$ (N_+), o número de spins $s_i = -1$ (N_-) e o número de spins $s_i = 0$ (N_0):

$$\Omega(N_+, N_-, N_0) = \frac{N!}{N_+! N_-! N_0!} \qquad N_+ = \frac{N - N_0 + M}{2} \qquad N_- = \frac{N - N_0 - M}{2}$$

Com esta parametrização,

$$\Omega(M, N_0, N) = \frac{N!}{\left(\frac{N-N_0+M}{2}\right)! \left(\frac{N-N_0-M}{2}\right)! N_0!}$$

onde $M \in \{-(N - N_0), -(N - N_0) + 2, \ldots, (N - N_0) - 2, (N - N_0)\}$, $N_0 \in \{0, \ldots, N\}$.

1. Calcule numericamente o valor médio exacto como função da temperatura do módulo da magnetização

para β entre 0.1 e 1.5 e para valores de $D \in \{0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1\}$

$$\left\langle \frac{|M|}{N} \right\rangle = \sum_{M,N_0} \frac{|M|}{N} \Omega(M, N_0, N) \frac{e^{-\beta H(M,N_0,N)}}{Z(\beta)}$$
$$Z(\beta) = \sum_{M,N_0} \Omega(M, N_0, N) e^{-\beta H(M,N_0,N)}$$

Sugestão: O cálculo da combinatórica envolve números muito grandes. O idela é usar a fórmula de Stirling,

$$\log(n!) = n\log(n) - n + \frac{1}{2}\log(2\pi n)$$

e notar que o valor médio fica inalterado se deslocar a energia $-\beta H(M, N_0, N) \to -\beta H(M, N_0, N) - C$ nas exponenciais.

2. Para cada temperatura a distribuição de probabilidades da magnetização é dada por,

$$P_{N,\beta}(M, N_0, N) = \frac{e^{\ln(\Omega(M,N_0,N)) - \beta H(M,N_0,N)}}{Z(\beta, N)} \tag{1.1}$$

e a distribuição de probabilidade da magnetização é dada por,

$$P_{N,\beta}(M) = \sum_{N_0} P_{N,\beta}(M, N_0)$$

Gere uma amostra de valores aleatórios de M e N_0 com a distribução pretendida usando o método von Neumann. Com esta amostra $\{M_1, M_2, \ldots, M_K\}$

(a) Represente o histograma da amostra aleatória gerada e compare com a distribuição teórica para $\beta \in \{0.1, 0.5, 0.75, 0.9, 1.0, 1.05, 1.1, 1.2, 1.5\}$ e $D \in \{0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1\}$.

(b) Meça a autocorrelação da magnetização para $\beta = 1.05$,

$$corr_M(\tau) = \frac{\langle M_i M_{i+\tau}\rangle - \langle M_i\rangle^2}{\langle M_i^2\rangle - \langle M_i\rangle^2}$$
$$\langle M_i M_{i+\tau}\rangle = \frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L} M_i M_{i+\tau} \tag{1.2}$$

2. Exercício

Na pergunta anterior efectuamos uma simulação Monte Carlo gerando as amostras da variável M. Será que a amostra gerada corresponde à gerada por uma dinâmica do sistema de N spins com o Hamiltoniano

$$H = \frac{N^2 - M^2}{N} + D(N - N_0)$$

e com o algorítmo de Metropolis?

1. Para testar implemente o algoritmo de Metropolis para N spins:

   - Atribua a cada um dos N spins do sistema uma variável $\pm 1, 0$ com probailidade uniforme.
   - Considere um passo de tempo o seguinte algoritmo:

  - Escolha um spin com probabilidade uniforme.
  - Proponha alterar o seu valor e aceite com a probabilidade $\min\left(1, e^{-\beta\Delta H}\right)$ senão fique no mesmo estado.

2. Compare as distribuições de probabilidade assiptótica da magnetização para vários valores de β e D.

3. Os amostras geradas são equivalentes às do primeiro problema?

Bom Trabalho