LISTA 5

Thales Freitas Macêdo
DRE: 115 162 177

30 de dezembro de 2022

1 Exercício 1

1.a)

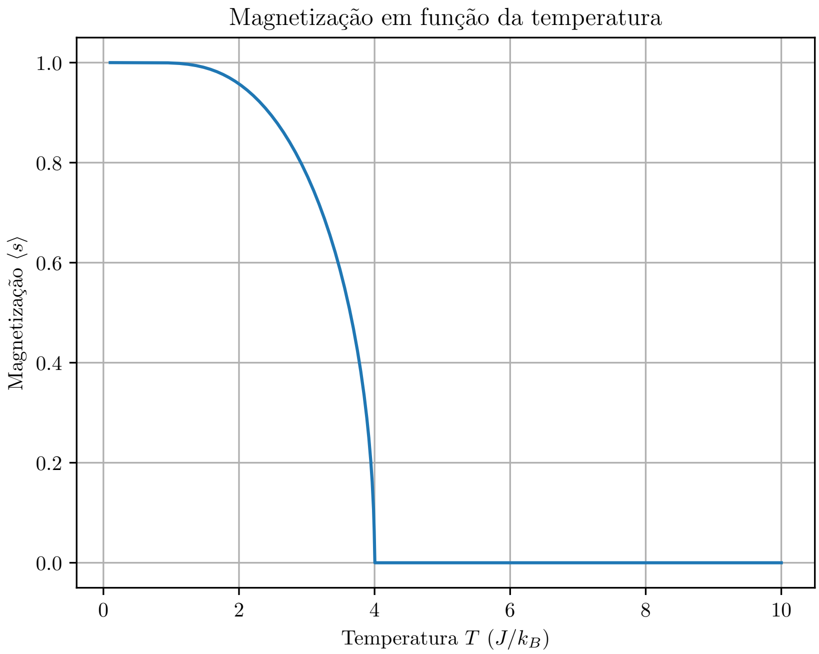

Figura 1: Gráfico da magnetização em função da temperatura, pela solução da equação de campo médio do modelo de Ising na rede quadrada.

Para resolver numericamente a equação

$$\langle s \rangle = \tanh\left(\frac{zJ\langle s \rangle}{k_B T}\right) \tag{1}$$

usei o método de Newton-Raphson. Esse método consiste em aproximar a raíz de uma função $f(x)$ pela raíz x_1 da reta tangente a f em uma primeira aproximação x_0 da raíz. Esse processo pode ser repetido, obtendo a fórmula iterativa

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \tag{2}$$

que expressa a aproximação x_{i+1} em termos da aproximação x_i anterior.

Para isso considerei a função

$$f(\langle s \rangle) = \langle s \rangle - \tanh\left(\frac{zJ\langle s \rangle}{k_B T}\right), \tag{3}$$

cujas raízes são as soluções desejadas. Para a rede quadrada, o número de primeiros vizinhos é 4, e portanto $z = 4$. Considerei $J > 0$ e expressei a temperatura em unidades de J/k_B. Assim, encontrei a raíz positiva não-trivial de $f(\langle s \rangle)$ para múltiplos valores de T, compreendidos entre 0 e 10.

1.b)

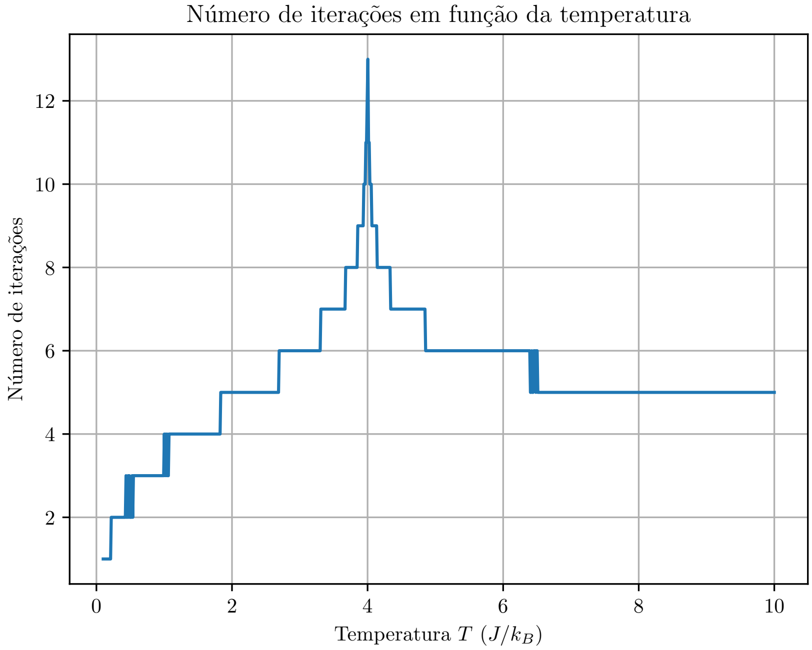

Figura 2: Gráfico do número de iterações em função da temperatura do item anterior.

Para obter as soluções do item anterior, usei a aproximação inicial

$$\langle s \rangle_0 = 5 \tag{4}$$

e a condição necessária para o término das iterações

$$\left| f(\langle s \rangle_{i+1}) \right| < 1 \times 10^{-8}. \tag{5}$$

1.c)

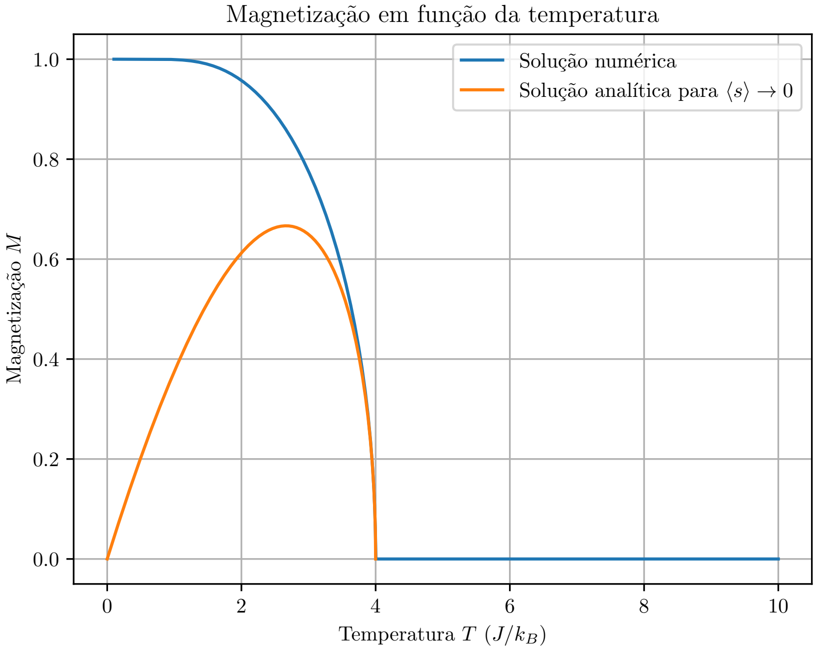

Figura 3: Gráfico da magnetização em função da temperatura.

A solução analítica para pequenos valores de $\langle s \rangle$ é adequada somente para valores de T próximos ao valor crítico $T_c = 4$.

1.d)

Para a rede cúbica, a única diferença é que $z = 6$. Assim, os resultados são quase idênticos aos anteriores.

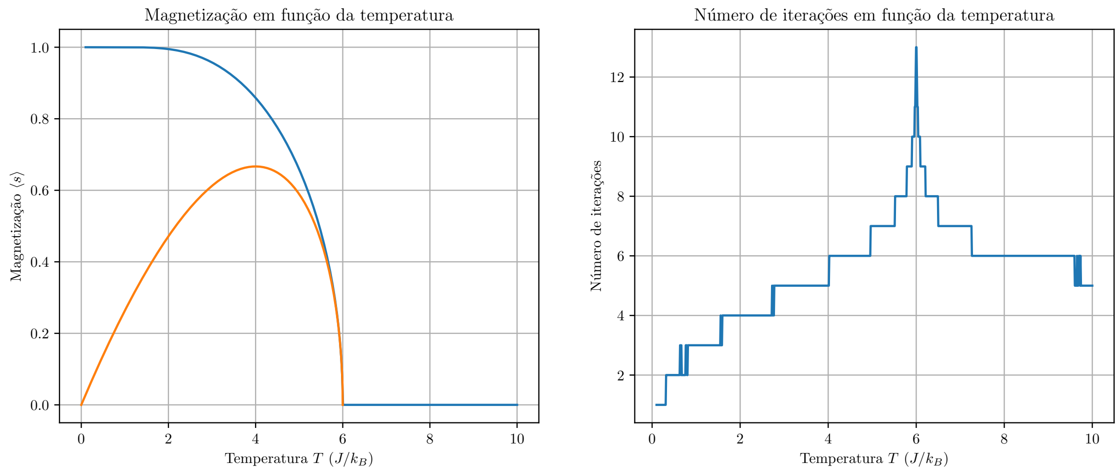

Figura 4: Gráfico da magnetização em função da temperatura.

2 Exercício 2

2.a)

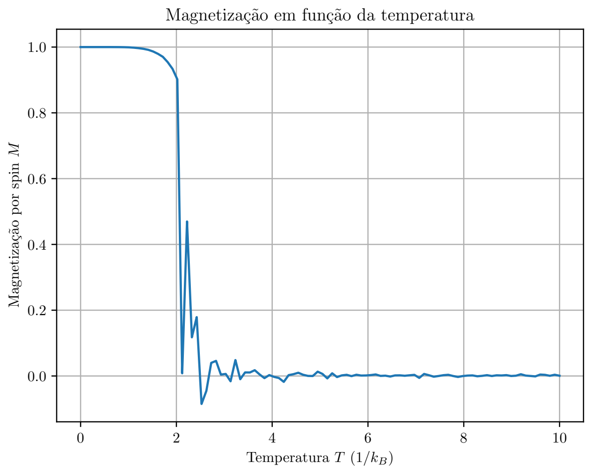

Figura 5: Gráfico da magnetização em função da temperatura.

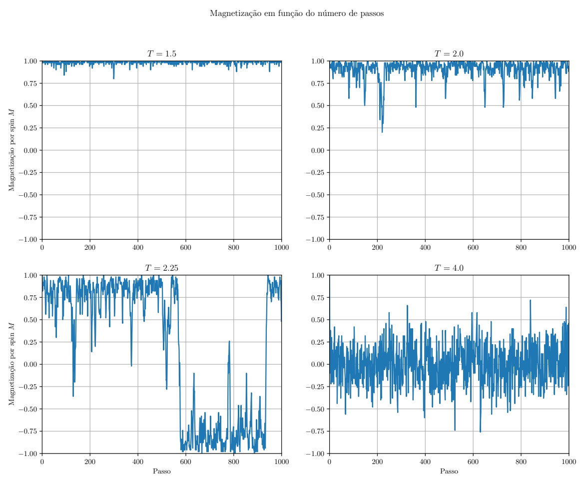

Figura 6: Gráfico da magnetização em função do número de passos.

Para calcular a magnetização, usei o algoritmo de Metropolis para uma rede 10×10 e um tempo de simulação de 1000 passos. Começo com um array 10×10, com todos os valores iguais a 1, representando os spins. Escolho um valor para a temperatura. Assim, inicio um passo, que consiste em varrer a rede de spins, coluna por coluna. Para cada spin, determino a energia E_0 da rede, usando a fórmula

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j, \tag{6}$$

e a energia da rede caso o spin estivesse invertido, E_1, determino a energia necessária para trocar o spin, $E_{\text{flip}} = E_1 - E_0$. Uso condições de contorno periódicas, de modo que considero interações entre os spins da primeira e última colunas, e interações entre os spins da primeira e última linhas. Se a energia $E_{\text{flip}} \leq 0$, eu troco o spin de orientação. Se a energia $E_{\text{flip}} > 0$, eu gero um número aleatório r entre 0 e 1. Faço então uma comparação de r com o fator de Boltzmann da energia E_{flip}. Se $r \leq \exp(-E_{\text{flip}}/k_{\text{B}}T)$, eu troco o spin de orientação. Caso contrário, eu o mantenho com a mesma orientação. Assim eu gero a rede de spins para o passo seguinte. Repito o procedimento para o número de passos desejado, no caso 1000.

2.b)

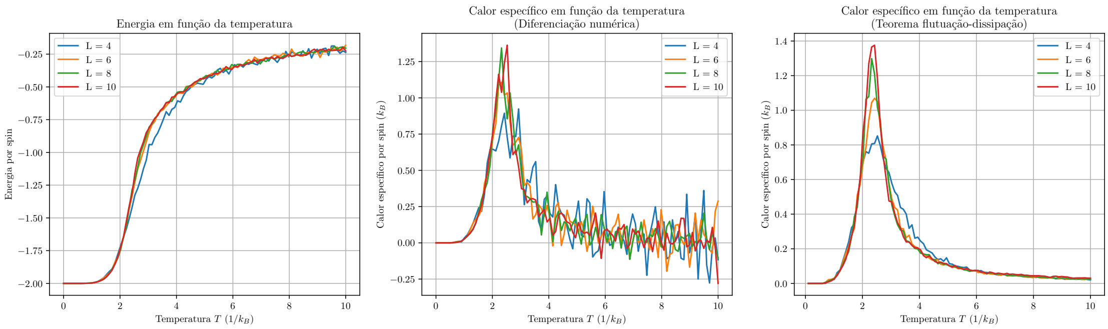

Figura 7: Gráfico do calor específico em função da temperatura para redes de diferentes tamanhos.

Pelos gráficos do meio e da direita na figura 7, o resultado obtido por diferenciação númerica é muito mais ruidoso do que aquele obtido pelo teorema flutuação-dissipação.

2.c)

Estimei as temperaturas críticas obtendo a temperatura do calor específico (pelo método da flutuação-dissipação) máximo nos gráficos do item anterior. Os resultados, na tabela 1, são quase metade daquele obtido pelo método do campo médio.

L	T_c $(1/k_\mathrm{B})$
4	2,53
6	2,42
8	2,32
10	2,42

Tabela 1: Tabela contendo os valores de temperaturas críticas para diferentes tamanhos de rede.

2.d)

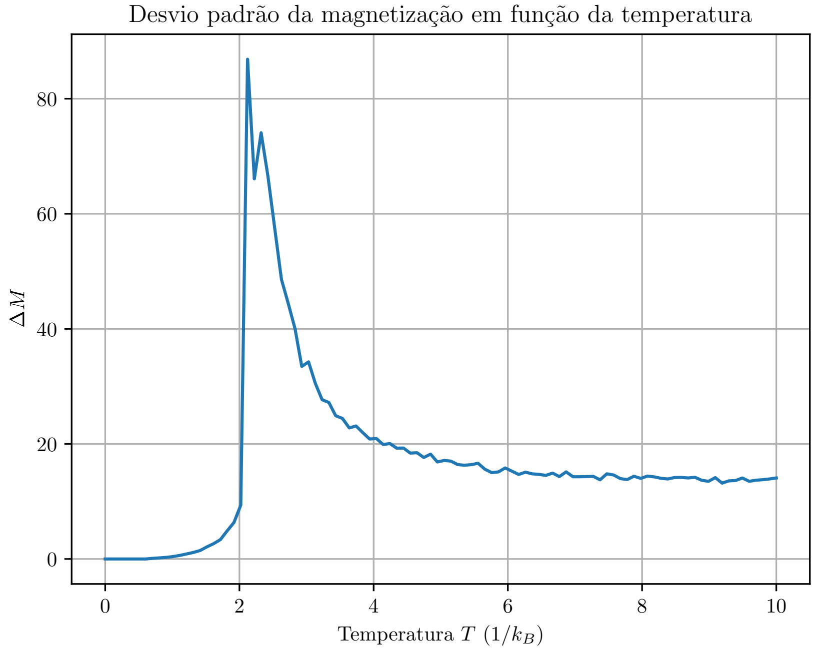

Figura 8: Gráfico do desvio padrão da magnetização em função da temperatura.

Como o desvio padrão da magnetização tembém uma singularidade em torno dos mesmos valores de temperatura que os ítens anteriores, também podemos obter a temperatura crítica a partir desse gráfico. Estimei a temperatura crítica como a temperatura do desvio padrão máximo. Assim obtive $T_c = 2{,}12$. Esse valor é pouco menor do que os obtidos no ítem anterior.