Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Ciências Naturais e Exatas
Departamento de Física
Laboratório de Teoria da Matéria Condensada

DIAGONALIZAÇÃO EXATA APLICADA AO MODELO DE ISING

Nathan Kellermann

19 de Setembro de 2014

Objetivo

O objetivo deste trabalho é fazer um estudo inicial do método de diagonalização exata. O modelo escolhido para a aplicação do método foi modelo de Ising.

O Modelo de Ising

O modelo foi inicialmente proposto por Wilhelm Lenz e resolvido para uma rede unidimensional por seu orientando, Ernest Ising. Mais tarde Lars Osanger resolveu o modelo para uma rede bidimensional. Embora simples, o modelo de Ising permite descrever uma série de fenômenos magnéticos, concordando bem com os resultados experimentais. O Hamiltoniano que descreve o modelo é dado por:

$$\mathcal{H} = -J\sum_{i,j}^{N}\sigma_i\sigma_j - h\sum_{i}^{N}\sigma_i \tag{1}$$

Diagonalização Exata

O método da diagonalização exata consiste em considerar todas as configurações possíveis que um dado sistema pode assumir.

$$\uparrow\uparrow \qquad \downarrow\uparrow$$

$$\uparrow\downarrow \qquad \downarrow\downarrow$$

Vantagens e desvantagens

A vantagem do método é dar o resultado exato dos observáveis. As desvantagens são, o tamanho da rede (redes pequenas) e a análise da T_C não pode ser feita através da magnetização.

Metodologia

O trabalho foi desenvolvido utilizando linguagem de programação Fortran 95. A rotina executada criava primeiro uma base, com todas as configurações possíveis do sistema, em seguida, era calculado o hamiltoniano, não foram utilizadas condições de contorno e o campo externo é considerado zero. A partir do hamiltoniano chega-se a outras grandezas como energia interna (U), calor específico (C_V) e a correlação do sistema (f_C). As grandezas são obtidas utilizando-se as equações abaixo:

$$U = \sum \frac{H_i e^{-\beta H_i}}{nZ} \tag{2}$$

$$f_C = \sum \frac{H_i e^{-\beta H_i}}{N_C Z} \tag{3}$$

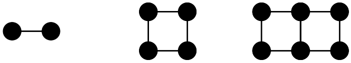
$$C_V = \frac{1}{T^2}[\sum \frac{H_i^2 e^{-\beta H_i}}{Z} - \frac{(\sum H_i e^{-\beta H_i})^2}{Z^2}] \tag{4}$$

Com β e Z sendo:

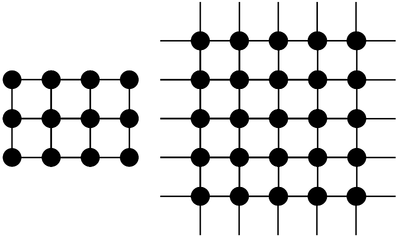
$$\beta = \frac{1}{K_b T}$$

$$Z = \sum_{i=1}^{n} e^{-\beta H_i} \tag{5}$$

Como o método considera todas as configurações, a magnetização é nula, a análise da T_C foi feita através do máximo do C_V. Com os valores de temperatura obtidos, foram feitos dois tipos de extrapolação. Um deles utilizando $\frac{1}{n}$ e o outro $\lambda = \frac{N_B}{N_S(\frac{z}{2})}$.



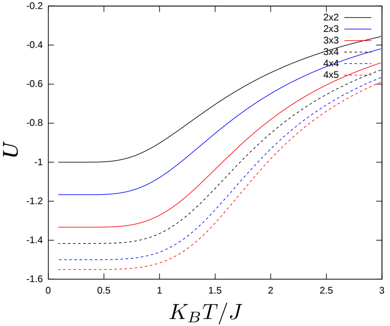
$\lambda = \frac{1}{4}$ $\lambda = \frac{1}{2}$ $\lambda = \frac{7}{12}$



$\lambda = \frac{17}{24}$ $\lambda = 1$

Resultados

Energia interna da rede quadrada por sítio.



Função correlação para rede quadrada:

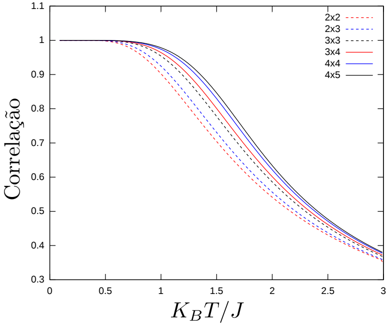
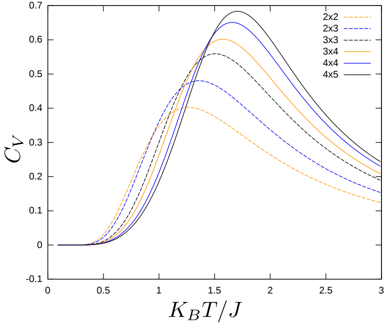
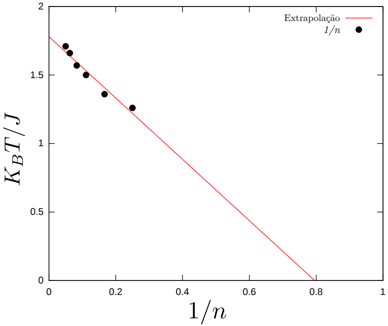


Figura 4

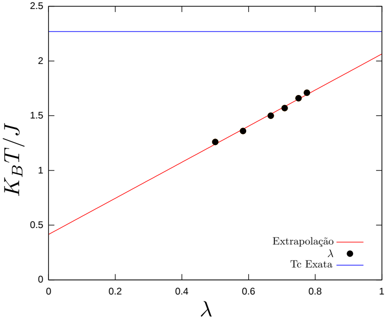
Calor específico para rede quadrada:



Extrapolações:



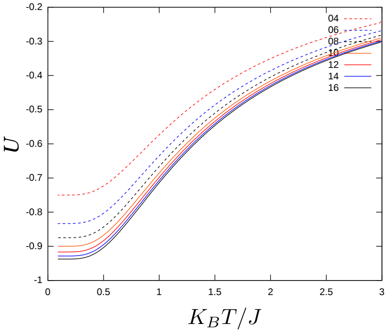
$T_C = 1.7798$


2.5
2
1.5
1
0.5
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
K_BT/J
λ
Extrapolação
λ
Tc Exata

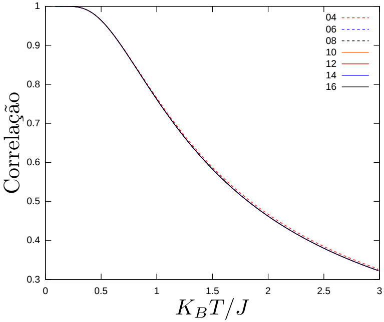
$T_C = 2.0641$

Resultados

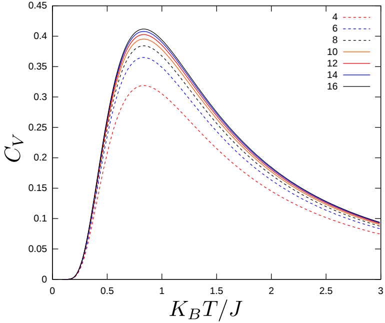
Energia interna da rede unidimensional por sítio.



Função correlação para rede unidimensional:



Calor específico para rede linear:



Conclusão

O método de diagonalização exata, aplicado ao modelo de Ising, mostrou-se uma ferramenta válida na aproximação da temperatura crítica deste modelo. Embora seja um método de tamanho finito, distante do limite termodinâmico, a energia interna e o calor específico apresentaram um comportamento semelhante ao obtido com sistemas infinitos. Tais resultados aproximam-se cada vez mais dos valores para sistemas infinitos a medida que o número de sítios na rede aumenta.