

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Vinícius de Souza Miralhas

**Transições de fase magnéticas em sistemas de spins
interagentes**

São Carlos

2022

Vinícius de Souza Miralhas

Transições de fase magnéticas em sistemas de spins interagentes

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Bacharel em Física.

Área de concentração: Física Teórica e Experimental

Orientador: Prof. Dr. Eric de Castro e Andrade

São Carlos

2022

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Miralhas, Vinícius de Souza
Transições de fase magnéticas em sistemas de spins
interagentes / Vinícius de Souza Miralhas; orientador Eric
de Castro e Castro -- São Carlos, 2022.
27 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Física) --
Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São
Paulo, 2022.

1. Modelo de Ising. 2. Expoentes críticos e transição de
fase. 3. Métodos de Monte Carlo. I. Castro, Eric de
Castro e, orient. II. Título.

RESUMO

Um magneto cuja hamiltoniana descreve o modelo de Ising é formado por uma rede de spins interagentes, no qual o spin de cada sítio interage apenas com seus vizinhos próximos. Tipicamente, magnetos deste modelo apresentam a existência de uma fase anti ou ferromagnética de ordenamento espontâneo para baixas temperaturas e uma fase paramagnética desordenada a altas temperaturas, ambas separadas por uma temperatura crítica. Propriedades termodinâmicas do sistema, como energia média, capacidade térmica e susceptibilidade magnética, assim como a magnetização, dependem da temperatura. É de interesse físico mapear o comportamento destas quantidades com o aumento da temperatura, assim como avaliar seus perfis assintóticos na proximidade da transição de fase. Este trabalho consistiu no desenvolvimento e na descrição de um programa computacional que utiliza métodos estocásticos de Monte Carlo no estudo de antiferromagnetos em aproximantes 2D de Ammann-Beenker para quase cristais, bem como a conceituação dos tópicos necessários de mecânica estatística. Discutiram-se as curvas características e os comportamentos assintóticos de cada quantidade física com relação aos resultados previstos em outra configuração mais simples (rede quadrada) para a qual existem resultados analíticos. Constataram-se a universalidade do modelo de Ising e a validade dos métodos numéricos empregados.

Palavras-chave: Modelo de Ising. Expoentes críticos e transição de fase. Métodos de Monte Carlo.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	7
1.1	O modelo de Ising e a solução do campo médio	7
1.2	Quantidades termodinâmicas e expoentes críticos	8
1.3	Redes de spins e o caso anti-ferromagnético	10
2	METODOLOGIA	13
2.1	Monte Carlo e o método de Metropolis	13
2.1.1	Implementação numérica	13
2.2	Método de Wolff	14
2.2.1	Introdução ao método	14
2.2.2	Implementação numérica	15
2.3	Cálculo das quantidades termodinâmicas	16
2.3.1	Magnetização e energia	16
2.3.2	Calor específico e susceptibilidade	16
2.3.3	Cumulante de Binder	17
2.3.4	O método de blocos	17
2.4	Parallel Tempering	18
3	RESULTADOS	19
3.1	Resultados preliminares	19
3.2	Transição de fase	19
3.2.1	Quantidades termodinâmicas	19
3.2.2	Cumulante de Binder	20
3.3	Finite-size scaling e expoentes críticos	20
4	CONCLUSÃO	25
	REFERÊNCIAS	27

1 INTRODUÇÃO

1.1 O modelo de Ising e a solução do campo médio

Sistemas de muitas partículas interagentes tipicamente manifestam o fenômeno de *transição de fase*,¹ onde o ordenamento médio dos componentes da amostra varia conforme um parâmetro termodinâmico. Por exemplo, uma quantidade de gelo, se aquecida, transitará para o estado líquido em torno de 0° C. Comportamento análogo é analisado em materiais ferromagnéticos, onde a magnetização é não nula abaixo de uma dada temperatura crítica. Em ambos os casos anteriores, as respectivas transições estão inerentemente associadas às temperaturas dos sistemas. Este projeto se propõe a estudar transições de fase com a temperatura no modelo magnético de Ising.

Considere um sólido de N átomos (cada um com seu respectivo *spin clássico*, ou *spin de Ising*) interagentes, descritos pela seguinte hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \left(-J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \right) + \left(-B \sum_i s_i \right), \quad (1.1.1)$$

onde B é o campo magnético externo, J é um parâmetro de acoplamento entre os vizinhos próximos da rede de átomos, $s_i = \pm 1$ indica o spin do sítio i e o primeiro termo da hamiltoniana é somado entre todos os pares de sítios próximos (adjacentes) da rede.^{2,3}

A hamiltoniana da eq. (1.1.1) descreve o modelo de Ising e será resolvida numericamente nas seções subsequentes deste texto. Uma solução analítica aproximada é obtida a partir da imposição da teoria de campo médio, que permitirá avaliar a magnetização média da rede.⁴ Para o caso ferromagnético ($J > 0$), o campo médio consiste em analisar o termo de interação com os vizinhos próximos (adjacentes) a um determinado sítio i como um campo externo fixo:

$$\mathcal{H}_i = - \left(J \sum_{\langle i,j \rangle} s_j + B \right) s_i = - (Jz \langle s_i \rangle + B) s_i = -B_m s_i, \quad (1.1.2)$$

onde z é o total de vizinhos próximos ligados a um dado sítio da rede e $s_j \rightarrow \langle s_i \rangle$ determina a aproximação do campo médio: o spin do sistema não altera significativamente entre os sítios vizinhos e o sítio s_i está submetido a um *campo efetivo* $B_m = Jz \langle s_i \rangle + B$. Dentre as quantidades de interesse que calcularemos, destaca-se $\langle s_i^n \rangle$ (n inteiro). Com a eq. (1.1.2), podemos determinar a média de cada potência de s_i diretamente pela função de partição

$$\mathcal{Z}_i = \sum_r \exp(-\beta \mathcal{H}_{i,r}) = \sum_r \exp(+\beta B_m s_{i,r}) = \sum_{s_i=\pm 1} \exp(\beta B_m s_i) = 2 \cosh(\beta B_m), \quad (1.1.3)$$

onde os r estados são $s_{i,r} = \pm 1$ e $\beta \equiv 1/k_B T$, em que k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do sistema.² Desta maneira, a identidade abaixo é obtida por derivadas sucessivas de $e^{s_{i,r} \beta B_m}$ com

relação ao campo efetivo:

$$s_{i,r}^n e^{s_{i,r} \beta B_m} = \frac{1}{\beta^n} \frac{\partial^n e^{s_{i,r} \beta B_m}}{\partial B_m^n}, \quad (1.1.4)$$

pois $s_{i,r}$ e β independem de B_m . Consequentemente, as eqs. (1.1.3) e (1.1.4) levam a:

$$\langle s_i^n \rangle = (\mathcal{Z}_i)^{-1} \sum_r s_{i,r}^n e^{s_{i,r} \beta B_m} = \frac{1}{\mathcal{Z}_i \beta^n} \frac{\partial^n \mathcal{Z}_i}{\partial B_m^n}, \quad (1.1.5)$$

relação esta que vale em geral para hamiltonianas que contenham termos do tipo $-XH$, onde X é uma variável termodinâmica (s_i associada a $\mathcal{H}_i$, neste caso) e H o seu campo conjugado (análoga ao B_m de $\mathcal{H}_i$).³ Estabelecendo $m = M/N \equiv (1/N) \sum_i s_i$ como a *magnetização por sítio* deste sistema, observa-se que $\langle m \rangle = (1/N) \sum_i \langle s_i \rangle = \langle s_i \rangle$.

As eqs. (1.1.3) e (1.1.5) resultam na *equação de auto-consistência*:

$$\langle m \rangle = \tanh \left(\frac{zJ\langle m \rangle + B}{k_B T} \right), \quad (1.1.6)$$

onde, por convenção, $\langle m \rangle$ será denotada por m . Neste trabalho, adotaremos o limite $B \rightarrow 0$. A equação de auto-consistência não pode ser resolvida analiticamente em função da temperatura de forma geral. No entanto, o comportamento do spin médio do sistema (que, como visto, independe de i), pode ser graficamente determinado ao comparar os lados direito e esquerdo da equação. A temperatura crítica de transição de fase, T_c , ocorre precisamente na temperatura em que uma solução não trivial para a eq. (1.1.6) se torna disponível:

$$T_c = \frac{Jz}{k} \quad (1.1.7)$$

Esta é a temperatura que diferencia os regimes ferromagnético ($T < T_c$) e paramagnético ($T > T_c$). Para uma rede bidimensional quadrada de átomos, $z = 4$, fornecendo $T_c = 4$ (em unidades de J/k_B). A solução numérica da eq. (1.1.6) fornece o gráfico na fig. 1 abaixo para a magnetização média por spin $\langle m \rangle$, que reproduz exatamente o comportamento esperado: a rede está no regime (anti) ferromagnético para $T < T_c$ e no paramagnético para $T > T_c$. A magnetização é comumente denotada como o parâmetro de ordem do sistema, justamente por ser o parâmetro termodinâmico que define o regime magnético e suas transições de fase.³

1.2 Quantidades termodinâmicas e expoentes críticos

No equilíbrio termodinâmico do sistema de spins interagentes, é de interesse físico determinar as quantidades termodinâmicas comumente associadas ao sistema analisado na seção anterior, como capacidade térmica (C), magnetização total (M), energia total (E) e susceptibilidade magnética por spin (χ), dentre outras.

É conveniente determinar o comportamento das quantidades termodinâmicas conceituadas anteriormente em temperaturas próximas da transição de fase. Retomando a equação de auto-consistência, quando $t = (T - T_c)/T_c$ (temperatura reduzida) é próxima de 0 (equivalentemente, quando

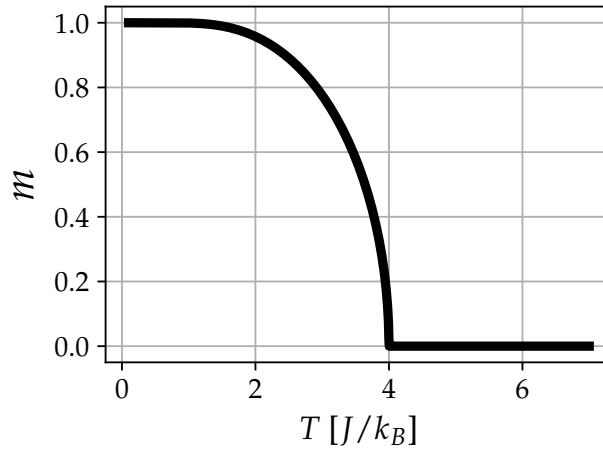


Figura 1 – Equação de auto-consistência resolvida numericamente na rede quadrada $z = 4$: magnetização por spin m como função da temperatura T e temperatura crítica $T_c = 4|J|/k_B$. Em $T < T_c$, o sistema está na fase ordenada, $m > 0$. A fase desordenada, de $m = 0$, inicia-se em $T > T_c$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

a magnetização é praticamente nula), uma expansão em série da tangente hiperbólica na própria eq. (1.1.6) até terceira ordem fornece

$$m \sim t^{1/2} \sim t^{+\beta}, \quad (1.2.1)$$

onde β será redefinido para representar o *expoente crítico* associado à magnetização média por spin.^{3,5} Este expoente é o responsável por governar como a magnetização $m \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow T_c^-$. Determina-se que, na aproximação do campo médio, $\beta = 1/2$. Veremos como este resultado se altera para as simulações numéricas diretas a partir da eq. (1.1.1).

O comportamento da susceptibilidade por spin χ é avaliado expandindo a eq. (1.1.6) até primeira em B :

$$\chi \equiv \frac{1}{N} \left. \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \right|_{B=0} \sim t^{-1} \sim t^{-\gamma}, \quad (1.2.2)$$

em que γ ($= 1$ na aproximação de campo médio) é o expoente crítico associado à divergência da susceptibilidade magnética (por spin) em T_c .

A entropia deste sistema é caracterizada pelo ensemble microcanônico, cujo total de microestados decorre das permutações com repetição dos N sítios entre aqueles que tenham mesma orientação,^{6,7} ao passo que a parcela da energia do sistema associada ao termo interagente é estimada por:

$$U_{\text{int}} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \text{ (v.p.)}} \langle s_i s_j \rangle = \frac{-JNzm^2}{2}, \quad (1.2.3)$$

onde o fator $1/2$ surge da contagem repetida de vizinhos próximos e $\langle s_i s_j \rangle = m^2$ é consequente da aproximação de campo médio.⁶

Novamente no limite $B \rightarrow 0$, calcula-se $c = (1/N)\partial U_{\text{int}}/\partial T$, cujo valor na transição de fase é dado por $c \sim \text{const.}$ não nula para $t < 0$ e $c \sim 0$ para $t > 0$, indicando descontinuidade.⁸ Assim como as outras duas quantidades mencionadas, c tem um expoente crítico: $c \sim |t|^{-\alpha}$, sendo que neste caso α é indeterminado por causa do salto entre dois valores constantes.

A rede quadrada infinita e periódica é bem conhecida e seus resultados analíticos podem ser consultados em Shankar.⁸ A tabela 1 explicita estes valores.

Tabela 1 – Comparação entre os expoentes críticos obtidos pela aproximação de campo médio e pela solução analítica da rede quadrada infinita e periódica. ν é o expoente crítico associado ao *comprimento de correlação*, introduzido na seção 3.3.

Expoente	Campo médio	Sol. analítica
α	salto	$\rightarrow 0^+$
β	1/2	1/8
γ	1	7/4
ν	1/2	1

Fonte: SHANKAR.⁸

1.3 Redes de spins e o caso anti-ferromagnético

Deve-se definir previamente a rede de spins interagentes a ser simulada por eq. (1.1.1). Neste trabalho, serão utilizados os aproximantes de rede de um quase cristal com simetria octogonal de Ammann-Beenker,^{9,10} como ilustrado na fig. 3, com acoplamento anti-ferromagnético ($J < 0$), ou seja, que favoreça alinhamento anti-paralelo dos spins a baixas temperaturas (fig. 2a). Estes aproximantes permitem subpartição em duas sub-redes (fig. 2b; forma-se, assim, um *sistema bipartido*), necessárias para definir corretamente a magnetização como o parâmetro de ordem do sistema, separando as fases antiferro e paramagnéticas):

$$\langle |m| \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{i=1}^N \varphi_i s_i \right| \right\rangle, \quad (1.3.1)$$

onde o módulo é introduzido para garantir a invariância do parâmetro de ordem mediante inversão de spins (fig. 2, esquerda: ao inverter todos os spins da rede, o sistema permanecerá alinhado, efetivamente descrevendo a mesma situação física)⁵ e φ_i é o “fator de fase” associado ao i – ésimo sítio: +1 na sub-rede azul, -1 na vermelha.

Fixando um sítio s_i de uma dada sub-rede (azul, por exemplo) e impondo a aproximação do campo médio $\langle s_j \rangle \rightarrow -\langle s_i \rangle$ para os vizinhos do i –ésimo sítio (fig. 2a), encontra-se um campo efetivo $B_m = -Jz\langle s_i \rangle + B$. Portanto, haverá um análogo da eq. (1.1.6) para a magnetização média na sub-rede onde a única mudança é o sinal de J . Em suma, a definição da eq. (1.3.1) permite tratar a magnetização da rede no sistema antiferromagnético como um todo sob a forma

$$\langle |m| \rangle = \tanh \left(\frac{z|J|\langle |m| \rangle + B}{k_B T} \right), \quad (1.3.2)$$

que gera resultados para aproximação de campo médio inteiramente análogos aos da seção 1.2.

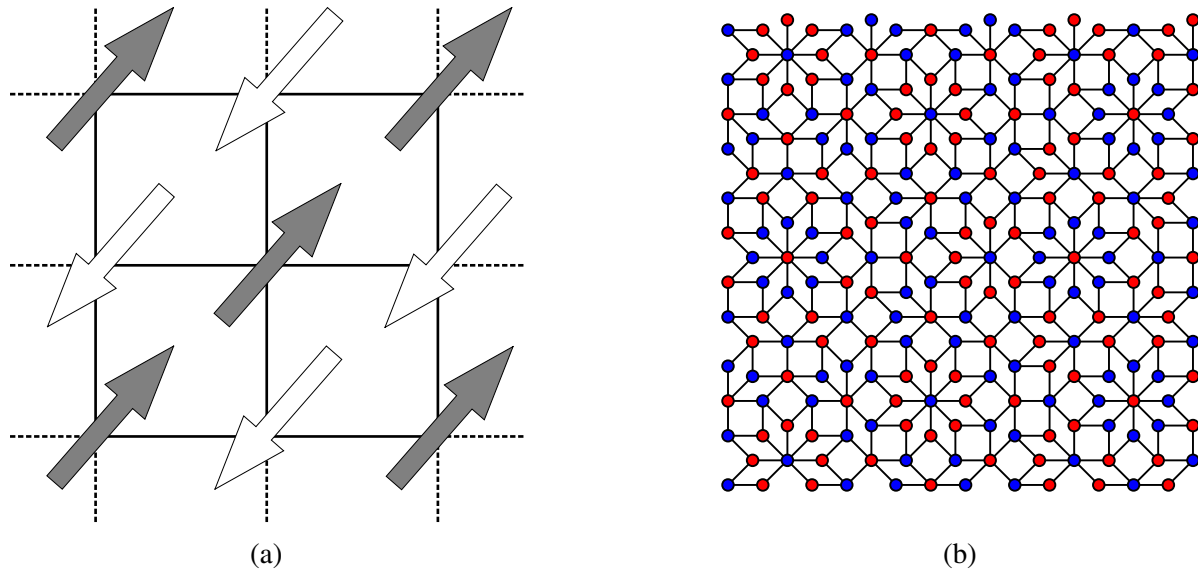


Figura 2 – a) Ilustração do alinhamento anti-paralelo dos spins a baixas temperaturas em um recorte de uma rede quadrada. Legenda: $\blacktriangle$ ou $\triangle$: $s_i = +1$ ou -1 para cada spin representado. b) Bipartição do aproximante octogonal de 239 sítios. Note que sítios em vértices opostos de um mesmo losango não são considerados vizinhos próximos. Isso garante a bipartição do aproximante e é a escolha consistente para incorporarmos a sua geometria aos observáveis físicos de interesse.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Os aproximantes de rede da fig. 3 têm escala de comprimento $L = (1+\sqrt{2})^k$, onde $k = 2, 3, \dots, 6$ para $N = 41, 239, 1393, 8119$ e 47321 ⁹ e utilizam condições abertas de contorno, no qual os vizinhos próximos de cada sítio da rede são indicados pelas ligações fechadas entre os vértices. As condições abertas de contorno são essenciais para garantir que o sistema seja bipartido para todo N , requisito este que é violado por condições periódicas de contorno. A qualidade dos resultados depende do tamanho da rede, de modo que poucos sítios não refletem a física do problema. Utilizamos apenas $N \geq 239$ neste trabalho. Para cada um destes aproximantes de rede, a quantidade de vizinhos, na média, é $\langle z \rangle \approx 4$, que se aproxima de uma rede quadrada.

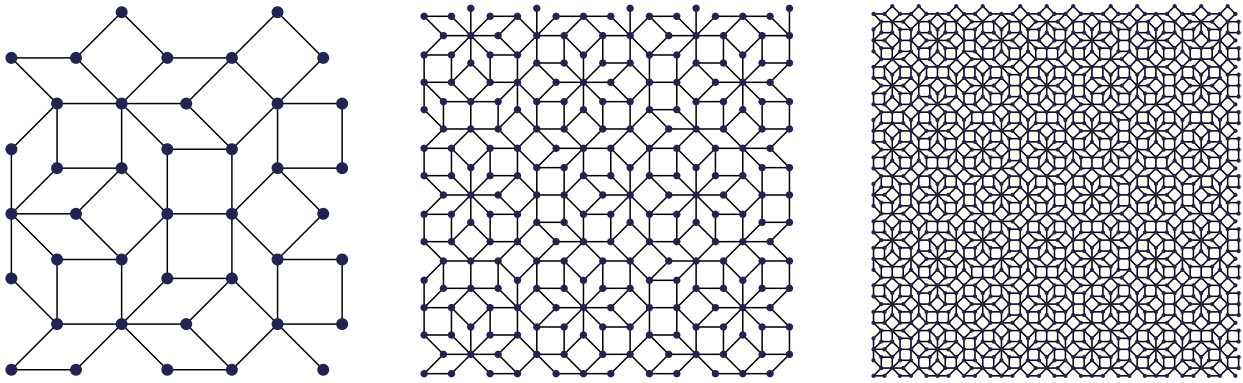


Figura 3 – Aproximantes de malha octogonal de $N = 41, 239$ e 1393 sítios, respectivamente. Nestes aproximantes de rede, a quantidade z de vizinhos a qual cada sítio está submetido não é constante. Na média, cada sítio está conectado a $\langle z \rangle \approx 4$ vizinhos, número típico de uma rede quadrada.

Fonte: Elaborada pelo autor.

2 METODOLOGIA

2.1 Monte Carlo e o método de Metropolis

Na introdução teórica, resolvemos a eq. (1.1.1) a partir da função de partição aproximada eq. (1.1.3) de um determinado sítio i do sistema termodinâmico. Introduziremos agora o *algoritmo de Metropolis*, um método estocástico de Monte Carlo que consiste no emprego de um gerador de números aleatórios para simular taxas de transição (ou *aceitação*) $A(a \rightarrow b)$ entre um estado inicial a e um estado final b . Este algoritmo nos permitirá avaliar as quantidades termodinâmicas numericamente, evitando aproximações como a do campo médio (seção 1.1).

A taxa de aceitação tipicamente depende de critérios de ergodicidade e da adoção de uma equação de balanço detalhado entre os dois estados acessíveis pelo sistema, como demonstrado por Newman e Barkema.³ A distribuição de Boltzmann impõe o seguinte balanço detalhado entre as taxas de aceitação:

$$\frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} = \exp\left(-\frac{E_b - E_a}{k_B T}\right), \quad (2.1.1)$$

onde E_a, E_b são as energias do sistema em seus respectivos estados. O algoritmo de Metropolis consiste em maximizar as taxas de aceitação entre dois estados distintos durante as simulações numéricas para que o tempo de execução seja minimizado. Ou seja, dadas as taxas $A(a \rightarrow b)$ e $A(b \rightarrow a)$, define-se a maior destas taxas como 1 e a menor delas como $\exp(-(E_b - E_a)/k_B T)$. Sucintamente,

$$A(a \rightarrow b) = \begin{cases} 1, & \text{se } E_b < E_a \\ \exp(-(E_b - E_a)/k_B T), & \text{se } E_b > E_a, \end{cases} \quad (2.1.2)$$

como demonstrado em Newman e Barkema; Giordano e Nakanishi.^{1,3}

Conceitualmente, a eq. (2.1.2) dita que, caso o próximo estado reduza a energia do sistema, a transição deverá sempre ser aceita. Do contrário, ocorrerá apenas com probabilidade $\exp(-(E_b - E_a)/k_B T)$. A possibilidade do aumento de energia deve existir para garantir a ergodicidade, ou seja, que todos os estados sejam acessíveis a partir da configuração atual.³ Numericamente, implementamos apenas o caso de transição entre estados que diferem por um único sítio na rede de spins, isto é, por estados antes e após o possível *flip* (inversão) de um único spin do sistema.

2.1.1 Implementação numérica

Há diferentes formas de implementar numericamente o algoritmo de Metropolis. Neste projeto, foi elaborado um programa em *Fortran 2008* fundamentado nas sugestões das referências Newman e Barkema; Giordano e Nakanishi; Sandvik.^{1,3,5}

Primordialmente, deve-se partir de uma configuração inicial dos spins da rede. Utilizamos ou $s_i = +1$ ou s_i aleatório para cada sítio i da rede. Esta escolha é arbitrária e não impacta nos resultados da simulação.³

Em seguida, calcula-se a energia $E_{\text{flip}} = E_b - E_a$ entre os estados sucedendo e precedendo a inversão de um dado spin da rede. A hamiltoniana que descreve a energia do sistema será alterada apenas pelo sítio invertido e seus vizinhos próximos. Seja k o sítio invertido. A variação $\Delta s_k = s_k^b - s_k^a = -2s_k^a$ permitirá calcular E_{flip} do seguinte modo:

$$\mathcal{H} = \left(-J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \right) + \left(-B \sum_i s_i \right) \quad (2.1.3)$$

$$\Delta \mathcal{H} = -J \Delta s_k \sum_{\langle k,j \rangle} s_j - B \Delta s_k = +2s_k^a (J \sum_{\langle k,j \rangle} s_j + B) = E_{\text{flip}}, \quad (2.1.4)$$

onde $\sum_{\langle k,j \rangle}$ é a soma dos spins dos j vizinhos próximos de k e B será considerado nulo para as simulações deste projeto. Cada tentativa de inversão consiste em escolher um spin aleatório da rede e testar o algoritmo de Metropolis. Denotaremos um ciclo de N tentativas diferentes por “varredura”. O número de varreduras necessárias para convergir, em geral, é dependente tanto da temperatura quanto do tamanho do sistema.

2.2 Método de Wolff

O método de Wolff consiste num algoritmo implementado predominantemente em temperaturas próximas à transição de fase, onde se destaca a formação de múltiplos domínios (ou *aglomerados*) de spins com a mesma orientação.³ Inverter todos os spins dentro destes domínios, um a um, é computacionalmente custoso. Vimos que os aproximantes de rede utilizados têm quantidades de vizinhos variáveis, então consideremos um sítio de um dos aproximantes que tenha exatamente 4 vizinhos. Caso este sítio esteja anti-paralelo com relação a todos os seus vizinhos, E_{flip} valerá $+8|J|$, reduzindo drasticamente a taxa de aceitação para inversão deste spin. Uma maneira mais eficiente de iterar sobre o sistema nestas condições seria mapear um aglomerado arbitrário por iteração e inverter todos os seus spins simultaneamente, contanto que as restrições de ergodicidade e de balanço detalhado abordadas na seção anterior sejam respeitadas.

2.2.1 Introdução ao método

Considere estados a (antes da inversão do aglomerado, vide fig. 4a) e b (após a inversão do aglomerado, fig. 4c), como exemplificado na fig. 4.

A construção do aglomerado se dá com a escolha de um spin aleatório na rede, comumente denotado de *semente*. No caso antiferromagnético ($J < 0$), spins de orientação oposta ao semente

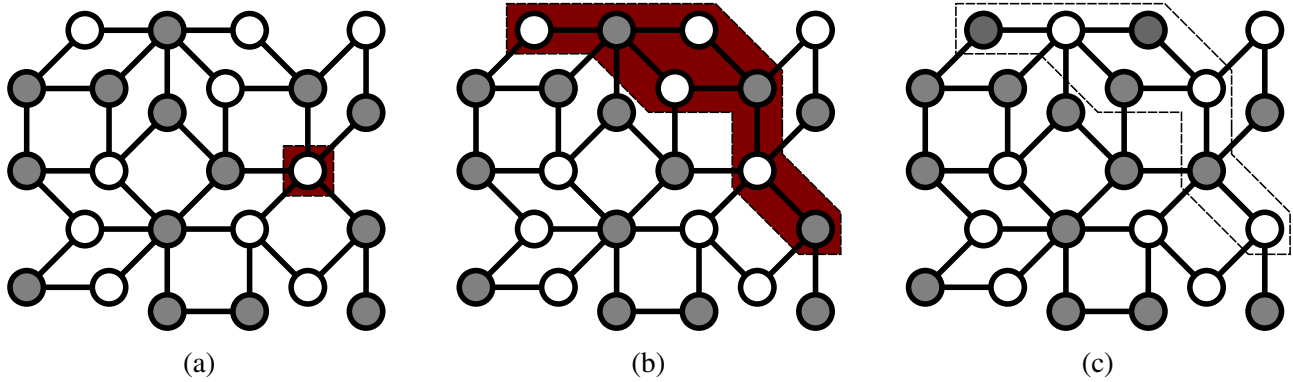


Figura 4 – Esta figura é um recorte do aproximante de 239 sítios que servirá de exemplo para ilustrar o método de Wolff. Legenda: ● ou ○ : $s_i = +1$ ou -1 . a) Um spin semente, evidenciado pelo fundo vermelho de contorno segmentado, é aleatoriamente selecionado. b) Novos sítios são adicionados ao aglomerado com a probabilidade de aceitação P_{adc} . c) Ao fim da rotina de crescimento, o aglomerado final terá todos os seus sítios invertidos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

são adicionados ao aglomerado com uma certa probabilidade P_{adc} .¹¹ Consequentemente, nem sempre todos os spins vizinhos de orientações opostas serão adicionados ao aglomerado, como indicado pela fig. 4b. O balanço detalhado impõe um vínculo entre o fator de Boltzmann $\exp(-\beta(E_b - E_a))$, as taxas de transição $A(a \rightarrow b)$ e $A(b \rightarrow a)$ e os pares de spins vizinhos antiparalelos que são formados ou destruídos após a transição direta ($a \rightarrow b$) ou inversa ($b \rightarrow a$). A condição que maximiza as taxas de transição é $P_{\text{adc}} = 1 - \exp(-2\beta|J|)$.^{3,11,12} A vantagem desta probabilidade P_{adc} em especial é que as taxas de transição se tornam unitárias, ou seja, a inversão do aglomerado final sempre será aceita, por menor que ele seja.

2.2.2 Implementação numérica

Escolhido o spin semente, todos os spins antiparalelos devem ser adicionados com a probabilidade constante P_{adc} da subseção anterior. Dentre as formas diferentes para armazenar a quantidade de spins contidas no aglomerado e suas localizações na rede, foi empregada uma rotina de *buffers*:

1. Cria-se um buffer que contém os vizinhos do spin semente que foram aceitos ao aglomerado;
2. É extraído um dos spins desse buffer, cujos vizinhos próximos serão testados e adicionados conforme P_{adc} ;
3. Assim que todos os vizinhos forem testados, um novo elemento do buffer é extraído, retornando ao item 2;
4. A rotina finaliza quando não houver mais elementos no buffer.

Diferentemente do que fora ilustrado na fig. 4c, é importante que os spins adicionados ao aglomerado tenham a sua orientação imediatamente trocada, impedindo que sejam novamente

adicionados ao buffer por seus vizinhos.

2.3 Cálculo das quantidades termodinâmicas

Conceituados os algoritmos essenciais de iteração sobre os aproximantes de rede, resta apresentar as rotinas para o cálculo das quantidades termodinâmicas de interesse. Para os propósitos deste problema, serão calculadas a energia E , a magnetização m , o calor específico c e a susceptibilidade magnética χ . Adicionalmente, o *cumulante de Binder* U_2 (seção 2.3.3) será calculado para auxiliar a determinação da temperatura crítica da rede.

2.3.1 Magnetização e energia

A magnetização do sistema (no caso antiferromagnético) foi definida na seção 1.3. Há como simplificar o processo ao calcular a soma de spins apenas uma única vez e então somar as variações de magnetização após cada iteração de Metropolis ou Wolff, mas as rotinas já são suficientemente eficientes, de modo que o ganho é mínimo. A constante de Boltzmann será simplificada para $k_B = 1$. A unidade de energia será $|J|$. O cálculo da energia depende unicamente da eq. (1.1.1) e pode ser simplificado ao somar os ganhos de energia ao final de cada passo de Metropolis ou Wolff.³

2.3.2 Calor específico e susceptibilidade

Ambas as quantidades foram conceituadas na seção 1.2. No entanto, a energia e a magnetização calculadas terão desvios consideráveis entre as iterações de um mesmo sistema em uma mesma temperatura. Isto é um traço intrínseco a métodos estocásticos como o de Monte Carlo. Extrair derivadas de dados ruidosos como estes implicará resultados de baixa confiabilidade.¹ A mecânica estatística, no entanto, provê maneiras alternativas de obtenção do calor específico e da susceptibilidade, conforme apresentado por Newman e Barkema.³

O calor específico (capacidade térmica por spin, $c = C/N$) decorre diretamente de aplicação do ensemble canônico:²

$$c = \frac{1}{N} \left. \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right|_V = \frac{1}{N} \frac{(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)}{k_B T^2} \quad (2.3.1)$$

Por sua vez, a susceptibilidade magnética (por spin) decorre da relação de conjugação entre a magnetização total $M = mN = \sum_i \varphi_i s_i$ (eq. (1.3.1)) e o campo externo (B). Como discutido anteriormente, o limite $B \rightarrow 0$ será utilizado em todas as simulações futuramente apresentadas. Portanto, substituindo respectivamente s_i e B_m por M e B na identidade eq. (1.1.5)*, resulta⁵:

$$\chi \equiv \frac{1}{N} \left. \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \right|_{B=0} = \frac{1}{\beta} \left(- \left(\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial B} \right)^2 + \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial B^2} \right) \Bigg|_{B=0} = \frac{(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)}{N k_B T} \quad (2.3.2)$$

* Onde nos referimos à definição $\beta \equiv 1/k_B T$.

2.3.3 Cumulante de Binder

Como conceituado na seção 1.2, a temperatura de transição de fase pode ser determinada com o auxílio dos expoentes críticos e dos pontos de divergência de χ ou c , por exemplo. Na prática, a temperatura crítica T_c não é precisamente mapeada com este método (e, na realidade, é mais conveniente utilizar a lógica reversa: encontrar o expoente crítico a partir da temperatura crítica mediante *finite-size scaling*, seção 3.3).

O cumulante de Binder fornece um método de alta precisão para encontrar uma faixa de valores para a temperatura de transição de fase em sistemas como o modelo de Ising, onde o parâmetro de ordem (magnetização, neste caso) é um escalar.⁵ A definição deste cumulante é

$$U_2 = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{R_2}{3} \right), \quad (2.3.3)$$

onde a razão

$$R_2 = \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \quad (2.3.4)$$

cancela as leis de potência de $\langle m^4 \rangle$ e $\langle m^2 \rangle^2$ precisamente em T_c , sendo também independente do tamanho da rede nesta temperatura. Portanto, as curvas de U_2 para diferentes tamanhos de rede devem se cruzar em T_c .⁵ Para $T > T_c$, $P(m)$ (distribuição de probabilidades da magnetização) é gaussiana e centrada em $m = 0$,⁵ de modo que $P(m) \approx (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp(-m^2/2\sigma^2)$,¹³ onde o parâmetro σ define a largura da distribuição e o domínio de $P(m)$ é aproximado por $m \in \mathbb{R}$ ao invés de $m \in [-1, 1]$. Consequentemente, as médias das potências pares de m , expressas por $\langle m^{2k} \rangle$, são dadas por:

$$\langle m^{2k} \rangle \approx \int_{-\infty}^{+\infty} P(m) m^{2k} dm = \frac{2^k \sigma^{2k}}{\sqrt{\pi}} \Gamma(k + 1/2) = \frac{\sigma^{2k}}{2^k} \frac{(2k)!}{k!}, \quad (2.3.5)$$

onde foram utilizadas propriedades da função especial Γ no tratamento da integral.¹³ A identidade da eq. (2.3.5) implica $\langle m^2 \rangle = \sigma^2$ e $\langle m^4 \rangle = 3\sigma^2$, de modo que $R_2 \rightarrow 3$ e $U_2 \rightarrow 0$ no limite de altas temperaturas. Para $T < T_c$, as distribuições $P(m)$ são picos fortemente centrados em $|m| = 1$ ($P(m) = \delta(m \pm 1)$), onde a ambiguidade do sinal reflete a invariância do sistema para $T < T_c$ mediante inversão de spins), tais que $\langle m^2 \rangle \approx \langle m^4 \rangle \approx 1$, levando a $R_2 \rightarrow 1$ e $U_2 \rightarrow 1$. A definição de U_2 , portanto, é propícia para a visualização da transição de fase. A $P(m)$ exata para este problema pode ser consultada na fig. 6.

2.3.4 O método de blocos

Todas as quantidades que envolvam valor médio na seção anterior serão avaliadas em blocos (uma vez que o sistema tenha atingido o equilíbrio térmico). Considere um bloco de 1000 varreduras (seção 2.1.1). As energias e magnetizações do sistema são armazenadas em cada uma das iterações do bloco. Ao fim da 1000ª varredura, calculam-se $\langle m^2 \rangle$, $\langle m \rangle$, $\langle E^2 \rangle$ e $\langle E \rangle$ com relação aos valores de cada varredura, determinando c , χ e U_2 . Ademais, $\langle m \rangle$ e $\langle E \rangle/N$ serão adotados como os valores de

magnetização e energia (por spin) do bloco. Após uma quantidade previamente fixada de blocos (10, por exemplo), os valores médios finais de cada quantidade termodinâmica $\langle Y \rangle$ e seu desvio padrão ΔY são calculados entre diferentes blocos e então visualizados graficamente.³ Em termos numéricos,^{5,13}

$$\langle Y \rangle = \frac{1}{N_B} \sum_{k=1}^{N_B} \langle Y_k \rangle; \quad (\Delta Y)^2 = \frac{1}{N_B(N_B - 1)} \sum_{k=1}^{N_B} (\langle Y_k \rangle - \langle Y \rangle)^2, \quad (2.3.6)$$

onde N_B é total de blocos e k é o índice de cada bloco.

2.4 Parallel Tempering

Parallel Tempering é um método empregado para acelerar a convergência do sistema e para evitar situações onde o estado atual da rede, para baixas temperaturas, permaneça aprisionado em um mínimo local de energia.¹⁴ Ao invés de simular a rede de spins para cada temperatura individualmente, o método de parallel tempering consiste em simular todas as temperaturas simultaneamente.

Após uma quantidade pré-definida de iterações de Metropolis e/ou Wolff, o algoritmo tentará trocar as configurações de spins entre temperaturas adjacentes T_i, T_{i+1} mediante a probabilidade de troca

$$P_{\text{troca}} = \begin{cases} \exp(-\Delta S), & \Delta S > 0 \\ 1, & \Delta S < 0 \end{cases} \quad (2.4.1)$$

onde ΔS é definido por

$$\Delta S = (1/T_{i+1} - 1/T_i)(E_i - E_{i+1}), \quad (2.4.2)$$

ou seja, movemos as configurações de spin para diferentes temperaturas. Isso faz com que uma configuração cuja $T \ll T_c$ possa ser aquecida até uma $T \gg T_c$. Ao ser resfriada novamente pelo ciclo do algoritmo, ela alcançará uma configuração distinta, melhorando assim a amostragem para baixas temperaturas, contornando os mínimos locais e complementando os algoritmos de Wolff e Metropolis.

A taxa média de aceitação de troca entre duas temperaturas adjacentes tipicamente deve ser próxima de 30% para tanto facilitar a convergência para baixas temperaturas como permitir boa eficiência de Monte Carlo. Esta probabilidade é calculada simplesmente considerando o total de trocas aceitas de configurações de spins para determinado par de temperaturas adjacentes pelo total de trocas propostas (bem-sucedidas ou não) para o mesmo par de temperaturas. Para tal, deve-se ajustar a lista de temperaturas iniciais e alterar manualmente o passo δT entre temperaturas adjacentes até que a aceitação média desejada seja atingida na região de análise (em especial, nas temperaturas próximas à transição de fase).¹⁴

3 RESULTADOS

3.1 Resultados preliminares

A seguir serão apresentadas as configurações de spins no aproximante de 239 sítios com $J < 0$ após ser atingida a convergência. Conforme mencionado na seção 1.3, quanto menor a temperatura, mais pronunciada é a bipartição da rede (e o anti-parallelismo entre os vizinhos próximos). Após a temperatura de transição de fase de $\approx 2.3 J/k_B$, o sistema desordena rapidamente. A distribuição $P(m)$ utilizada na definição do cumulante de Binder (seção 2.3.3) também foi calculada e será apresentada pela fig. 6.

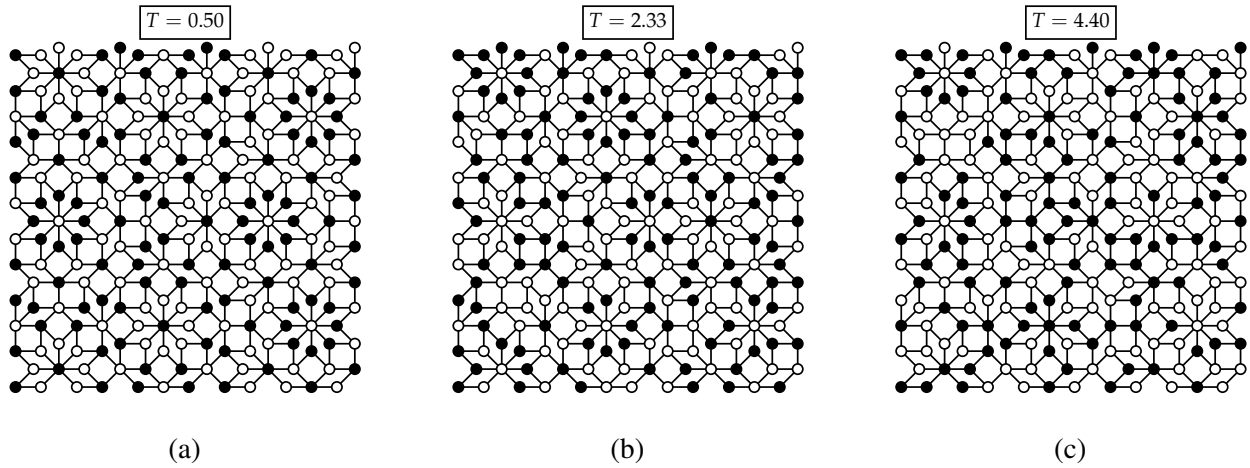


Figura 5 – Configuração dos spins em um aproximante de simetria octogonal de 239 sítios no regime anti-ferromagnético com condições abertas de contorno. Temperaturas em unidades de $|J|/k_B$.

Legenda: ● ou ○ : $s_i = +1$ ou -1 para cada sítio i .

Fonte: Elaborada pelo autor.

3.2 Transição de fase

3.2.1 Quantidades termodinâmicas

A fig. 7 apresenta os gráficos das quantidades termodinâmica para este modelo. Priorizou-se uma grade de temperaturas mais fina na região que contém a transição de fase, que pode ser avaliada qualitativamente pela divergência da susceptibilidade magnética ou do calor específico. Para cada temperatura de cada aproximante de rede, foram efetuados cerca de 2000 varreduras de Monte Carlo até convergir (mesclando Metropolis e Wolff, sendo que este último é priorizado para as temperaturas próximas de T_c) e outras 15000 por bloco para efetuar as médias.

Uma aproximação grosseira reitera o valor de transição obtido pela visualização das configurações finais de spins da seção anterior: cerca de $T_c = 2.3 |J|/k_B$. Ademais, um traço característico

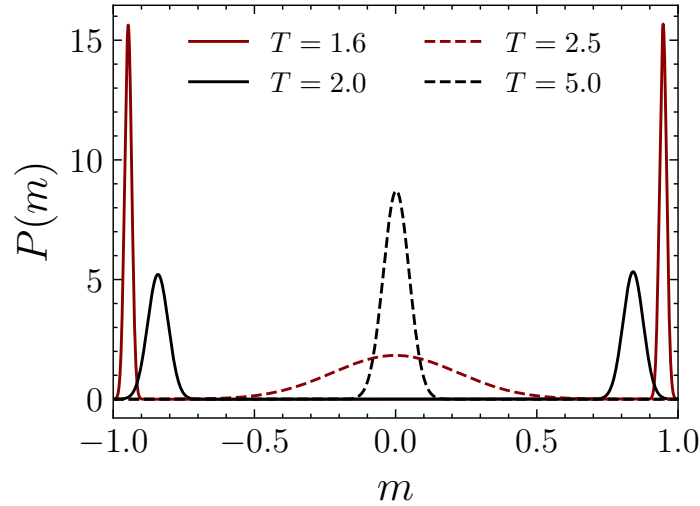


Figura 6 – Distribuição dos valores do parâmetro de ordem $P(m)$ para o aproximante de $N = 1393$ sítios em quatro temperaturas. A temperatura crítica é $T_c \approx 2.3|J|/k_B$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

de condições abertas de contorno é que as curvas de magnetização se cruzam próximas de T_c . Este comportamento não é observado com condições periódicas de contorno.

Energia e magnetização têm avaliação simples e direta; calor específico e susceptibilidade magnética, no entanto, decorrem das flutuações de E e m , respectivamente. Consequentemente, largos desvios são perceptíveis na região de transição de fase tanto para c como para χ , incentivando o uso do método de blocos para avaliar cada quantidade termodinâmica.

3.2.2 Cumulante de Binder

Introduzido na seção 2.3.3, o cumulante de Binder para estas simulações convergiu e as curvas dos quatro aproximantes de rede se interceptam num mesmo ponto, como indica a fig. 7d. A temperatura crítica estimada pelo cumulante de Binder concorda com os resultados previamente discutidos. A temperatura de transição encontrada graficamente é de $T_c = (2.39 \pm 0.01) |J|/k_B$, onde o erro é limitado pela resolução da escala de temperaturas.

3.3 Finite-size scaling e expoentes críticos

A avaliação dos expoentes críticos de cada quantidade é simplificada pelo *finite-size scaling*. Este método permite avaliar graficamente todas as curvas de uma determinada quantidade (susceptibilidade magnética, por exemplo) em diferentes tamanhos de rede utilizando uma relação de escala entre L (seção 1.3) e os expoentes críticos discutidos na seção 1.2.

O comprimento de correlação ξ , associado à distância média de influência de um dado spin da rede sobre qualquer outro, tem crescimento com o expoente crítico ν sob a forma $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \sim |t|^{-\nu}$,^{1,5}

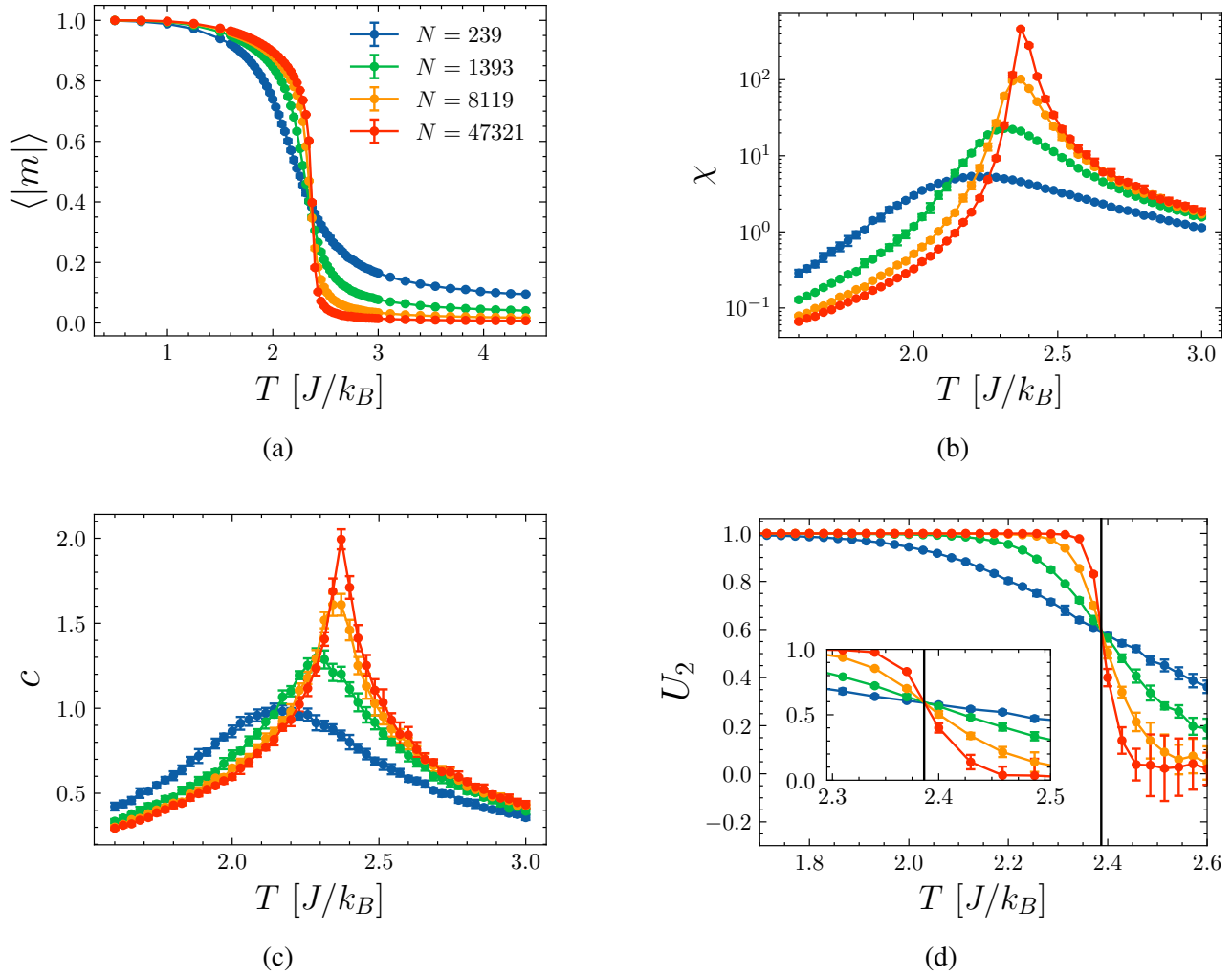


Figura 7 – Quantidades termodinâmicas para diferentes aproximantes de rede ($N = 239, 1393, 8119, 47321$).
 a) Magnetização por spin. b) Susceptibilidade magnética por spin. c) Calor específico por spin. d) Cruzamento dos cumulantes de Binder para cada tamanho de rede. Inserção: zoom ao redor de T_c .

Fonte: Elaborada pelo autor.

onde $t = (T - T_c)/T_c$ é a temperatura reduzida (seção 1.2). A partir de ν e ξ , determina-se uma escala comum a diferentes tamanhos de rede L mediante as transformações $y = QL^{-\kappa/\nu}$ e $x = tL^{1/\nu}$, onde Q é a quantidade em análise e κ o seu expoente crítico. Os erros de Q (seção 2.3.4) são analogamente transformados para $\Delta y = \Delta Q L^{-\kappa/\nu}$. O sinal de κ será negativo se a quantidade não divergir em T_c e positivo do contrário.⁵ Portanto, considerando os gráficos anteriores, $\kappa_m = -\beta$, $\kappa_\chi = +\gamma$ e $\kappa_c = +\alpha$.

A análise qualitativa inicial é sugerida por Newman e Barkema.³ Uma vez escolhidos T_c , ν e γ (ou β) iniciais, deve-se verificar o colapso dos pontos (x, y) sobre uma única curva (na faixa de t próxima a 0) para os distintos valores de L . Os erros dos expoentes críticos são avaliados pelos intervalos dos parâmetros sobre os quais os pontos permanecem colapsados. A fig. 8 apresenta o finite-size scaling na prática para as três quantidades termodinâmicas mencionadas. É importante ressaltar que a solução analítica (tabela 1) prevê $c \sim \log(|t|)$, de modo que o calor específico não tem

crescimento de lei de potência. Portanto, dado o crescimento logarítmico desta quantidade, é imposta a divisão por $\log(L)$ aos pontos y de c para que haja o colapso sobre uma mesma curva.¹⁵

Esta maneira qualitativa de determinar os expoentes críticos é suplementada por uma determinação quantitativa do parâmetro de qualidade (χ^2) de um ajuste polinomial aos pontos (x, y) do finite-size scaling.⁵ Este parâmetro é definido por

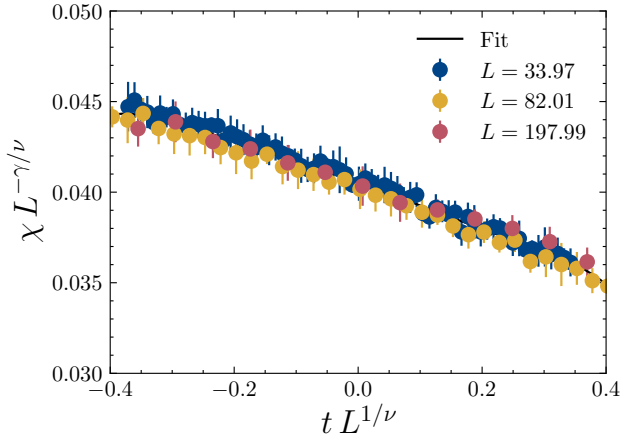
$$\chi^2 = \sum_{l=1}^n \left(\frac{y_l - y_l^*}{\sigma_l} \right)^2, \quad (3.3.1)$$

onde y_l^* é a função polinomial ajustada avaliada em x_l , n é o total de pontos (x_l, y_l) analisados e σ_l é o erro associado a cada y_l .¹³ Regressões polinomiais confiáveis apresentam $\chi^2/\text{g.l.} \approx 1$,^{5,13} onde g.l. representa os graus de liberdade da amostra de dados: (total de pontos) – (total de parâmetros do ajuste).

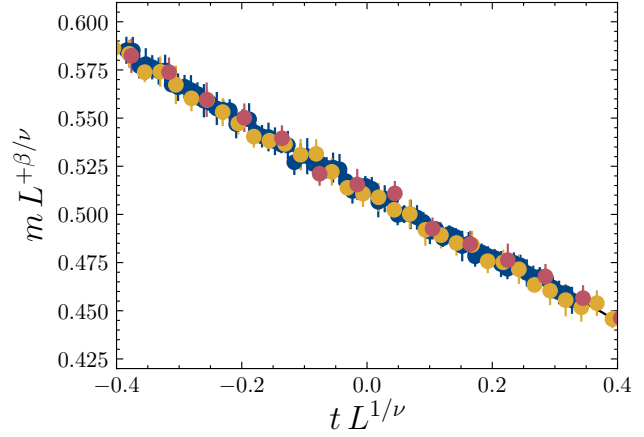
Os pontos (x, y) e os erros σ foram ajustados na faixa de $-4 \leq t \leq 4$ por uma função polinomial de 6ª ordem, como sugerido por Sandvik.⁵ Desenvolvemos um programa em Python que, dados os parâmetros iniciais T_c , ν e α , β ou γ , calcula o correspondente χ^2 do ajuste de (x, y) . Os expoentes críticos foram estimados do seguinte modo:

1. Para cada quantidade termodinâmica, definiram-se intervalos iniciais discretos para T_c , ν e seu respectivo expoente crítico (α , β ou γ);
2. Calculou-se χ^2 para cada permutação dos parâmetros. As permutações que forneceram bons ajustes foram armazenadas para análise posterior. Neste trabalho, consideramos $0.9 \leq \chi^2 \leq 1.1$ como a tolerância para χ^2 . Qualitativamente, os trios de parâmetros cujos χ^2 residem nessa faixa apresentam bons colapsos gráficos.
3. Finalizadas as permutações, calcularam-se a média e o desvio padrão de cada parâmetro salvo.

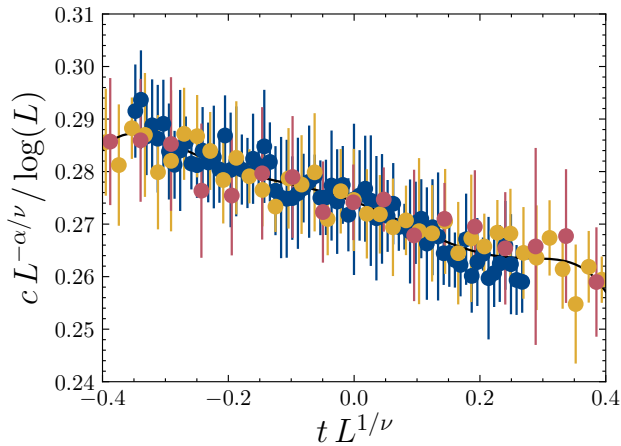
Os expoentes críticos estimados por ambos os procedimentos anteriores estão dispostos na fig. 8 e concordam com os resultados analíticos da tabela 1 para $N \geq 1393$. Isto reitera que a aproximação de campo médio é insuficiente para sistemas bidimensionais no modelo de Ising. As propostas numéricas foram suficientes para mapear ν , γ e β , além de consentirem com o valor previamente estimado para T_c pelo cumulante de Binder. Constata-se a equivalência entre os expoentes críticos do aproximante octogonal de quase cristal e a rede quadrada periódica, garantida pela universalidade do modelo de Ising 2D.⁸



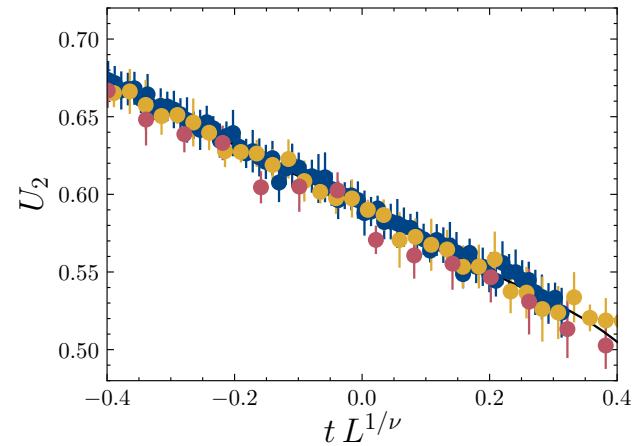
(a) Susceptibilidade magnética. $T_c = 2.385 \pm 0.003$, $\nu = 1.00 \pm 0.02$, $\gamma = 1.75 \pm 0.03$.



(b) Magnetização. $T_c = 2.387 \pm 0.002$, $\nu = 1.00 \pm 0.03$, $\beta = 0.13 \pm 0.02$.



(c) Calor específico. $T_c = 2.384 \pm 0.003$, $\nu = 1.00 \pm 0.03$, $\alpha = 0.06 \pm 0.04$.



(d) Cumulante de Binder. $T_c = 2.385 \pm 0.002$, $\nu = 1.00 \pm 0.03$.

Figura 8 – Finite-size scaling nos aproximantes de rede $N = 1393, 8119, 47321$ para χ , m e c . Cada L decorre da discussão da seção 1.3. Constata-se o colapso dos dados sobre uma única curva para os parâmetros T_c , ν , β , α e γ informados, incluindo suas respectivas tolerâncias. d) A razão R_2 tem seu comportamento de leis de potência cancelado em $T = T_c$. Portanto, o cumulante de Binder não possui correção de escala no eixo vertical.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4 CONCLUSÃO

Neste trabalho, foi explorado o modelo anti-ferromagnético de Ising em um aproximante de quase cristal com simetria de Ammann-Beenker cujas condições de contorno são abertas. Construímos a função de partição referente à aproximação do campo médio para a hamiltoniana que descreve este magneto. Empregamos conceitos de mecânica estatística para descrever as quantidades termodinâmicas de interesse (magnetização, energia, susceptibilidade e calor específico) bem como mapear expressões destas que possam ser avaliadas numericamente por métodos de Monte Carlo. Apresentamos e motivamos o funcionamento das rotinas de simulação computacionais capazes de evoluir temporalmente a configuração de spins deste sistema: Metropolis, que itera bem para altas temperaturas; Wolff, que facilita a convergência para temperaturas próximas da transição de fase e o *parallel tempering*, cujo principal objetivo é evitar o aprisionamento da simulação em mínimos locais de energia a baixas temperaturas. Caracterizamos a transição de fase do parâmetro de ordem a partir do cumulante de Binder e da divergência da susceptibilidade e calor específico. Determinamos as leis de potência associadas a cada quantidade termodinâmica, constatando assim a universalidade do modelo de Ising em redes bidimensionais: T_c depende da rede, ao passo que os expoentes críticos não. Mostramos que os aproximantes para o quase cristal são bipartidos e comportam um estado fundamental antiferromagnético, apesar de não serem periódicos e possuírem diferente número de vizinhos.

REFERÊNCIAS

- 1 GIORDANO, N. J.; NAKANISHI, H. **Computational Physics**. Londres: Pearson Education, 2006.
- 2 REIF, F. **Fundamentals of statistical and thermal physics**. Long Roove: Waveland Press, 2009.
- 3 NEWMAN, M. E.; BARKEMA, G. T. **Monte Carlo methods in statistical physics**. Oxford: Oxford University Press, 1999.
- 4 SIMON, S. H. **The Oxford solid state basics**. Oxford: OUP Oxford, 2013.
- 5 SANDVIK, A. W. Computational studies of quantum spin systems. **AIP Conference Proceedings**. 2010. v. 1297, n. 1, p. 135–338.
- 6 SELINGER, J. V. **Introduction to the Theory of Soft Matter**: From ideal gases to liquid crystals. Berlin: Springer International Publishing AG, 2016. ISBN 9783319370576.
- 7 SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. 2. ed. São Paulo: EDUSP, 2005. 472 p. ISBN 9788531403866.
- 8 SHANKAR, R. **Quantum field theory and condensed matter**: an introduction. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- 9 DUNEAU, M. Approximants of quasiperiodic structures generated by the inflation mapping. **Journal of Physics A: mathematical and general**, IOP Publishing, v. 22, n. 21, p. 4549–4564, nov 1989. DOI: 10.1088/0305-4470/22/21/017.
- 10 ARAÚJO, R. N.; ANDRADE, E. C. Conventional superconductivity in quasicrystals. **Physical Review B**, American Physical Society (APS), v. 100, n. 1, p. 014510, 2019.
- 11 MACKAY, D. J. **The Swendsen-Wang algorithm**. 2004. Capítulo complementar ao texto *Information Theory, Inference, and Learning Algorithms (Cambridge Univ. Press, 2003)*. Disponível em: <https://www.inference.org.uk/mackay/itila/swendsen.pdf>.
- 12 DOTSENKO, V. S. *et al.* Cluster monte carlo algorithms for random ising models. **Physica A: statistical mechanics and its applications**, Elsevier, v. 170, n. 2, p. 278–281, 1991.
- 13 ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. **Mathematical methods for physicists international student edition**. Waltham: Elsevier, 2005.
- 14 SWENDSEN, R. H.; WANG, J.-S. Replica monte carlo simulation of spin-glasses. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 57, p. 2607–2609, 1986. DOI:10.1103/PhysRevLett.57.2607.
- 15 COSME, C. M. **Monte Carlo methods in critical systems**. 2014. 81 p. Dissertação (Mestrado) — Departamento de Física e Astronomia da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (FCUP), Porto, 2014.