

Modelo de Ising em 2D

Estudo via Método de Monte Carlo

GUILHERME DAMACENA DE CASTRO, 11224150

Instituto de Física, Universidade de São Paulo - SP

Maio, 2022

Resumo

Um estudo computacional acerca do modelo de Ising 2D foi desenvolvido. Foram explorados extensivamente os fenômenos que surgem naturalmente através do estudo do modelo, como a magnetização espontânea de um sistema de spins. Através do cálculo de quantidades observáveis, foi possível visualizar o efeito da transição de fase próxima à chamada temperatura crítica. Utilizando os valores gerados para as grandezas observáveis, foi estimado o valor da temperatura crítica $T_c^{est} = 2.28(4)u.e.^1$.

I. INTRODUÇÃO

O modelo de Ising é uma forma simplificada de descrever o comportamento de ferromagnetos [1] (ou de um domínio magnético de um ferromagneto, que pode ser muito mais complicado). Nele, é considerada uma vizinhança de spins (O sistema físico) que possuem direção privilegiada (vertical) e podem assumir apenas dois valores: +1 (spin para cima) e -1 (spin para baixo). Além disso, a manifestação de um spin depende dos spins vizinhos (e apenas dos vizinhos) através da hamiltoniana (1), onde J é a energia de interação entre 2 spins vizinhos, s_k é o k -ésimo spin (operador) do sistema, h é o campo magnético externo e $\langle i, j \rangle$ representa que a soma deve ser feita nos vizinhos. Além disso, é importante perceber que o modelo de Ising supõe condições de contorno periódicas. Isso significa que o último spin do sistema é vizinho do primeiro (em alguma direção).

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (1)$$

Note que se $J > 0$, a dinâmica do sistema favorece que os spins tenham orientações paralelas. Isso porque é atingido um estado de menor energia total [2]. Se $J < 0$, o alinhamento antiparalelo dos spins vizinhos é favorecido.

Um exemplo simples de sistema descrito pelo modelo de Ising é uma linha unidimensional de spins, como a mostrada na figura 1. Lá, é possível ver que o spin 3 (em vermelho) tem orientação "para cima" e é cercado por spins que têm orientação "para baixo". Note ainda que o Spin 6 tem como vizinhos os spins 1 e 5 (condição de contorno periódica). Sendo assim, se considerarmos $h = 0$, a contri-

buição do spins 3 para a energia total do sistema é:

$$E_3 = -J \cdot (s_3 s_2 + s_3 s_4) = -J \cdot (-1 - 1) = 2J$$

Enquanto a contribuição do spin 5 (em azul) para a energia é:

$$E_5 = -J \cdot (s_5 s_4 + s_5 s_6) = -J \cdot (-1 + 1) = 0$$

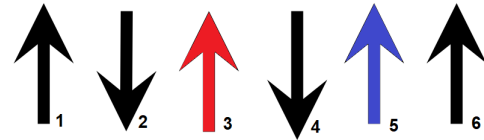


Figura 1: Fileira de 6 spins em uma dimensão.

Fica claro, portanto, que para uma fileira de 6 spins (que é verdade em geral), J positivo favorece alinhamentos paralelos e J negativo favorece alinhamentos antiparalelos. Neste trabalho, estamos interessados em sistemas ferromagnéticos e, portanto, em geral, tomaremos $J = 1$.

O modelo de Ising em 1D descrito acima possui solução exata conhecida. Ernst Ising demonstrou que esse sistema não apresenta transições de fase a temperatura finita [3]. Isso foi decepcionante pois o estudo de materiais era capaz de observar transições de fase para baixas (mas finitas!) temperaturas. Como será discutido adiante, o motivo principal para a ausência de transições de fase é o fato de que, em um sistema 1D, cada spin tem apenas 2 vizinhos. Esse número não é suficiente para que seja manifestada a natureza das transições de fase magnéticas. O próximo passo é,

¹Unidades especiais.

portanto, estudar sistemas de dimensões maiores. O problema é que esses sistemas são muito difíceis e ficaram por muito tempo sem solução. Foi apenas na década de 40 que Onsager [3] foi capaz de obter uma solução analítica para o problema.

I. O modelo de Ising em 2D

Em duas dimensões, ao invés de uma fileira de spins, há uma malha. Cada spin da malha possui 4 vizinhos com os quais interagem. Na figura 2, por exemplo, o spin 9 possui como vizinhos os spins 3, 8, 10 e 15. Já o spin 18 possui como vizinhos os spins 12, 17, 1 e 13.

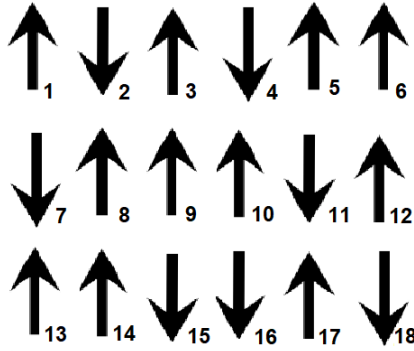


Figura 2: Malha de spins.

O sistema de spins em 2D modelado por Ising tem solução muitíssimo mais complicada que o 1D e foi feita pela primeira vez por Onsager na década de 40 [3]. Usando os princípios de mecânica estatística, Onsager foi capaz de mostrar que há comportamento crítico (transição de fase) no modelo de Ising 2D quando $h = 0$. A magnetização de um sistema de spins com número de spins tendendo ao infinito (limite termodinâmico) em 2D é dada pela equação (2), onde k_b é a constante de Boltzmann, J é a constante de interação entre spins, T é a temperatura e T_c é uma temperatura crítica dada por (3).

$$M(T) = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \left(1 - \left(\sinh \frac{2J}{k_b T}\right)^{-4}\right)^{\frac{1}{8}}, & T < T_c \end{cases} \quad (2)$$

$$T_c = \frac{2J}{k_b \ln(1 + \sqrt{2})} \quad (3)$$

O fato do comportamento da magnetização mudar de maneira não suave (descontinuidade na primeira derivada) reflete o fenômeno denominado **magnetização espontânea**, que representa a magnetização do sistema sem a influência de campo magnético a temperaturas baixas

graças à interação entre os spins. Isso é muito interessante e marcou o modelo de Ising como o primeiro (e até então, único [3]) modelo clássico *quase*-realista de um sistema de muitos corpos.

Num sistema real, os observáveis interessantes que podem ser medidos são descritos pelas equações (4) a (7)[4], E é a energia de uma configuração 2D de spins, M é a sua magnetização, C é o calor específico do sistema, χ é sua susceptibilidade magnética, K_b é a constante de Boltzmann, T é a temperatura, a notação $\langle \rangle$ representa os valores médios para várias configurações de spins e N é a dimensão lateral da malha de spins, o que faz com que a quantidade total de spins na malha seja N^2 .

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (4)$$

$$M = \sum_i^{N \times N} s_i \quad (5)$$

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N^2 K_b^2 T^2} \quad (6)$$

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{N^2 K_b T} \quad (7)$$

Para análise, é melhor utilizar os valores das energias e magnetizações "por sítio", o que significa que serão divididos pela quantidade total de spins no sistema N^2 .

A teoria descrita até aqui será estudada aos olhos de uma simulação computacional nas seções II e III a seguir.

II. DESCRIÇÃO DO MÉTODO NUMÉRICO

Para realizar o tratamento computacional do modelo de Ising em 2D, foi utilizado um método muito conhecido chamado **Algoritmo de Metropolis**, baseado no método de Monte Carlo.

I. Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis, criado por Nicholas Metropolis em 1953, tem o objetivo de gerar uma coleção de estados de acordo com uma distribuição $P(x)$ desejada. Para isso, utiliza-se um sistema de proposta e aceitação-rejeição: Um elemento inicial x_0 é sorteado. Um novo elemento x é proposto. Dada uma probabilidade de aceitação $A(x_0 \rightarrow x)$, a transição é aceita ou rejeitada, [4].

I.1 O Algoritmo de Metropolis Implementado para o Modelo de Ising 2D

No nosso caso, a distribuição desejada é a distribuição de Boltzmann [1]. O algoritmo de Metropolis, então, funciona conforme a seguinte sequência de passos.

1. É sorteada uma configuração inicial de spins em 2D (numa malha de dimensões $N \times N$);
2. Calculam-se a energia e a magnetização da configuração inicial usando as equações (4) e (5);
3. De forma aleatória, uma posição da malha (um spin), é escolhido;
4. Uma nova configuração desse spin é proposta (o spin é "flipado", ou seja, se o spin na posição sorteada era para cima (+1), o spin proposto é para baixo (-1) e o contrário também vale);
5. A proposta é testada por aceitação ou rejeição de acordo com as condições:
 - Se $\Delta E < 0$, a mudança energética é favorável e, portanto, o spin proposto é aceito e a configuração de spins é atualizada;
 - Se $\Delta E \geq 0$, um número aleatório r entre 0 e 1 é sorteado de maneira uniforme. O spin proposto é, então, aceito, apenas se $P_{flip} = e^{-\frac{\Delta E}{\beta}}$.

Onde ΔE representa a mudança energética causada pela mudança do spin na posição sorteada, P_{flip} representa a probabilidade de transição do spin e $\beta = \frac{1}{K_b T}$, onde K_b é a constante de Boltzmann e T é a temperatura.

6. Os itens 3, 4 e 5 são repetidos para todas as posições na malha (de forma aleatória e sem passar novamente por uma posição onde um novo spin já foi proposto).
7. Após uma **varredura** (teste de transição para todos os spins na cadeia), os valores atualizados da energia total e da magnetização são armazenados (equações (4) e (5)).
8. Após um total de $Nmax$ varreduras, são calculados a magnetização absoluta média $\langle M \rangle$, a magnetização absoluta quadrada média $\langle M^2 \rangle$, a energia média $\langle E \rangle$, a energia quadrada média $\langle E^2 \rangle$, o calor específico C e a Susceptibilidade Magnética χ para todos os valores armazenados. Os valores médios são calculados através da equação (8), onde G representa um observável, $Nmax$ é o número de varreduras e i é o índice do observável calculado para a configuração de spins após a varredura i . O Calor Específico e a Susceptibilidade Magnética são calculadas usando as equações (6) e (7).

$$\langle G \rangle = \frac{1}{Nmax} \sum_i^{Nmax} G_i \quad (8)$$

Para garantir a compreensão do leitor, é importante esclarecer que o procedimento descrito é realizado para um valor de campo magnético h e para uma temperatura T . Isso significa que após todas as varreduras pela malha de spins, são obtidos um valor de magnetização média, um valor de energia média, um valor de calor específico e um valor de susceptibilidade magnética.

I.2 A Variação Energética

Um passo particular da atualização é o cálculo da variação de energia. Uma pessoa, a princípio, pode pensar que é razoável calcular a energia da malha de spins pela definição (4) antes de fazer a mudança do spin e, então, calcular a energia de uma malha já com o spin trocado, também pela definição, para, por fim, calcular a diferença $E_{flipado} - E_0 = \Delta E$. No entanto, isso faz com que o processo computacional seja muito longo! Afinal, para cada spin da malha será necessário fazer uma varredura (cálculo da energia total) por toda a malha. Sendo assim, é interessante buscar uma expressão geral da mudança energética gerada pela inversão de um spin qualquer.

Podem parecer algo complicado de se fazer, mas não é. Basta perceber que toda a contribuição energética que um spin tem é baseada em seus 4 vizinhos. Seja, por exemplo, um spin S_k cercado pelos vizinhos $S_{up} = S_u$, $S_{right} = S_r$, $S_{down} = S_d$ e $S_{left} = S_l$. Toda a parcela da energia total que envolve o spin S_k pode ser expressa como.

$$E_{S_k} = -JS_k(S_u + S_d + S_r + S_l) - hS_k$$

Sendo assim, no caso do spin S_k ser invertido $S_k \rightarrow -S_k$, é possível calcular a variação energética através da equação (9). Assim, calcular a variação energética se torna muito mais simples.

$$\Delta E = -J(S_u + S_d + S_r + S_l)(-S_k - S_k) - h(-S_k - S_k)$$

$$\Delta E = 2S_k[J(S_u + S_d + S_r + S_l) + h] \quad (9)$$

II. Implementação Computacional

Para estudar propriedades físicas que envolver o rico modelo de Ising 2D, é necessário usar o algoritmo de Metropolis para calcular as quantidades observáveis $\langle M \rangle$

²O módulo é adicionado para que a comparação com a literatura seja mais simples, além de que, como veremos, para baixas temperaturas, o sistema pode se magnetizar arbitrariamente com spins para cima ou para baixo, o que pode tornar o gráfico muito ruidoso e de difícil interpretação.

$| \langle T \rangle |^2$, $\langle E \rangle(T)$, $C(T)$ e $\chi(T)$ para diferentes valores de temperatura e campo magnético e estudar sua dependência nesses parâmetros.

Para isso, foi desenvolvido um algoritmo na linguagem de programação Python. No apêndice A, há um manual de uso do algoritmo, além do link para download.

III. DISCUSSÃO E RESULTADOS

Aqui são apresentadas discussões interessantes sobre o comportamento obtido dos sistemas de spins e sua dependência nos parâmetros T (temperatura), h (campo magnético) e N (tamanho da malha de spins). É importante mencionar que, por simplicidade, serão deixadas de lado as dificuldades importadas pelas unidades físicas envolvidas no problema. Para a ilustração do problema, é suficiente utilizar unidades especiais nas quais $K_b = J = 1$.

I. Ausência de Campo Magnético

O caso em que $h = 0$ é um caso rico em fenômenos físicos. Afinal, uma pessoa que não conhece bem o comportamento de ferromagnetos pode pensar que não há motivo para um sistema se magnetizar (ter essencialmente todos os spins alinhados paralelamente) na ausência de campos magnéticos. No entanto, a seção I, vimos que Lars Onsager mostrou que, para temperaturas abaixo da temperatura crítica T_c , há o que chamamos de magnetização espontânea.

Um estudo inicial interessante é a visualização da malha de spins.

Seja uma malha inicial aleatória de dimensão 20×20 sorteada ao acaso. Você pode visualizá-la na figura 3, onde os quadradinhos pretos representam os spins para baixo (-1), e os brancos representam spins para cima (+1). Em seguida, é utilizado o algoritmo de Metropolis para fazer mil varreduras $N_{max} = 1000$ pela malha de spins. A malha resultante para diferentes valores de temperatura pode ser observada nas figuras 4, 5, 6 e 7.

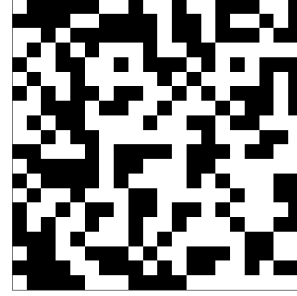


Figura 3: Configuração inicial sorteada de spins numa grade 20×20 .



Figura 4: Configuração final de spins calculada pelo método de Metropolis para $J = 1$, $h = 0$ e $K_b = 1$ numa grade 20×20 para $T = 1$

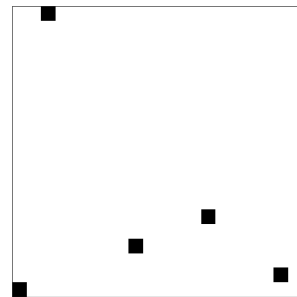


Figura 5: Configuração final de spins calculada pelo método de Metropolis para $J = 1$, $h = 0$ e $K_b = 1$ numa grade 20×20 para $T = 2$

Ao analisar as figuras, fica claro que algo interessante ocorre para baixas temperaturas (e some com o aumento

dela). Isso dá a entender que algum tipo de **magnetização** acontece **espontaneamente** a baixas temperaturas.

Algo que também é bastante interessante acontece quando aumentamos o tamanho da grade. Mesmo para um número grande de iterações, em uma malha de tamanho 200×200 é possível ver que o resultado não é uma malha completamente tomada por apenas uma configuração de spins. Na figura 9, vemos a configuração final, após 1000 varreduras, de uma grade 200×200 que teve condição inicial arbitrária (figura 8). É possível ver três claros domínios magnéticos. Dois com spin para baixo (em preto) e um maior com spin para cima. O nome dessa configuração é estado **metaestável** [1]. Acontece que, em algumas temperaturas, surgem configurações estáveis de spins cuja magnetização total é aproximadamente nula mesmo abaixo da temperatura crítica.

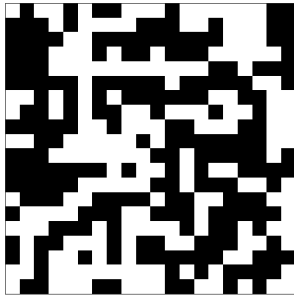


Figura 6: Configuração final de spins calculada pelo método de Metropolis para $J = 1$, $h = 0$ e $K_b = 1$ numa grade 20×20 para $T = 5$

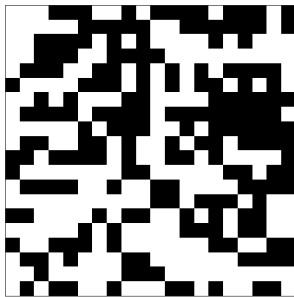


Figura 7: Configuração final de spins calculada pelo método de Metropolis para $J = 1$, $h = 0$ e $K_b = 1$ numa grade 20×20 para $T = 10$

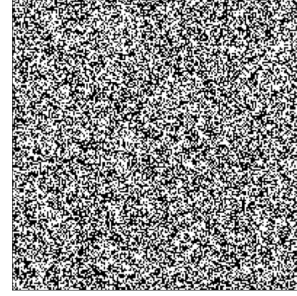


Figura 8: Configuração inicial de spins sorteada numa grade 200×200 para $T = 1$

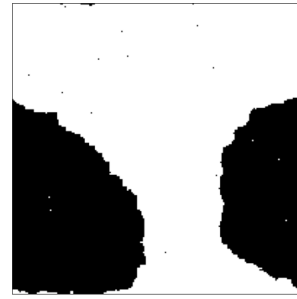


Figura 9: Configuração inicial de spins calculada pelo método de Metropolis usando $J = K_b = 1$ e $h = 0$ numa grade 200×200 para $T = 1$

Agora que já vimos o que efetivamente ocorre com as malhas, é hora de estudarmos o comportamento médio dos observáveis.

I.1 A Magnetização Média

Aplicando o método de Metropolis, podemos observar o comportamento do módulo da magnetização média com a variação da temperatura. Como vimos anteriormente, é esperado que haja magnetização para baixas temperaturas $T < T_c$. Na figura 10 é possível ver o comportamento da magnetização média calculada como descrito na seção I.1. A magnetização foi calculada para uma grade 10×10 . É possível ver que a comparação com o esperado pela teoria de Onsager é razoável, afinal, a queda forte no valor da magnetização média por spin ocorre próximo ao valor da temperatura crítica prevista por Onsager.

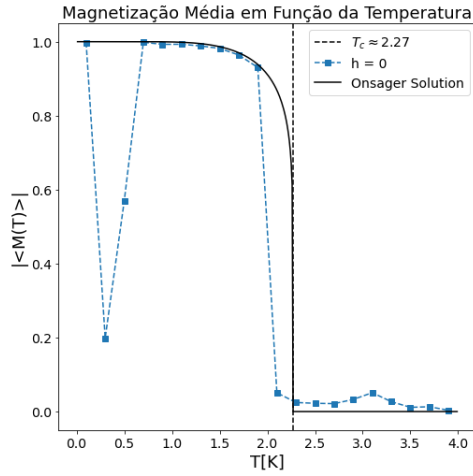


Figura 10: Magnetização absoluta média em função da temperatura em $[T] = \frac{J}{K_b}$ em uma grade 10×10 para $J = K_b = 1$ e $h = 0$. A condição inicial da matriz de spins foi aleatória. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

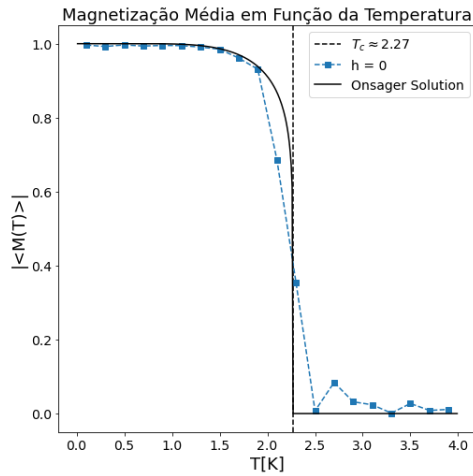


Figura 11: Magnetização absoluta média em função da temperatura em $[T] = \frac{J}{K_b}$ em uma grade 10×10 para $J = K_b = 1$ e $h = 0$. A condição inicial da matriz de spins foi escolhida com todos os spins para cima. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

Uma análise interessante surge acerca daqueles pontos que parecem destoar do esperado para temperaturas abaixo de $T = 1 \frac{J}{K_b}$. São estados não magnetizados (pouco magnetizados) para temperaturas baixas? Mas é esperado que todos os estados ali sejam completamente magnetizados. Portanto, isso se trata de um estado metaestável! Como na figura 9. Esses estados aparecem durante a simulação no caso da matriz de spins inicial ser aleatória. É um

fenômeno razoavelmente comum. Sendo assim, para que a análise fique mais clara, para as simulações adiante, uma matriz inicial de magnetização por sítio igual a 1 será utilizada. Isto é, a matriz inicial será sempre escolhida como uma matriz com todos os spins para cima. Como todas as simulações são feitas com muitas varreduras, o comportamento geral não é afetado, mas evitamos esses pontos "fujões" que atrapalham a visualização do comportamento geral. Refazendo a simulação para uma configuração inicial magnetizada, obtemos o gráfico na figura 11.

Finalmente podemos pensar sobre o significado desse resultado. A conclusão que podemos tirar é que, sem a presença de campo magnético, há algo intrínseco ao modelo de Ising (sistemas de spins interativos) que faz com que esse comportamento descontínuo de grandezas observáveis ocorra. Esse comportamento descontínuo que ocorre próximo à chamada temperatura crítica é chamado de **transição de fase**. É muito curioso como a simulação computacional é capaz de captar tamanha criticalidade. Afinal, não há qualquer forçamento escancarado para que o sistema tenha quase todos os spins paralelos a baixas temperaturas.

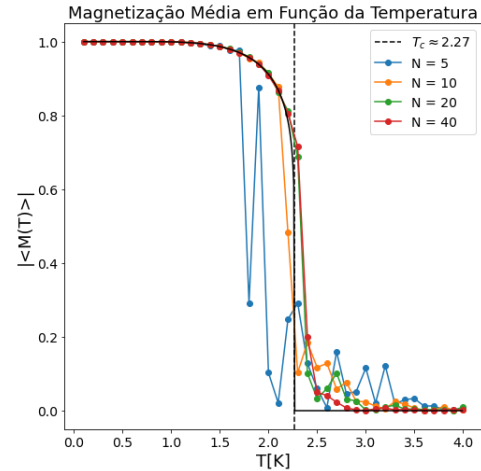


Figura 12: Magnetização média por sítio em função da temperatura para malhas de spins de lados $N = 5, 10, 20, 40$ para $J = K_b = 1$ e $h = 0$. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

Podemos, ainda, notar que, apesar dos valores obtidos para a magnetização serem aproximadamente coerentes com o esperado pela solução de Onsager, a solução vale considerando a quantidade de elétrons indo a infinito ($N^2 \rightarrow \infty$). Na figura 12, vemos o comportamento da magnetização média por sítio para diferentes quantidades de spins no sistema ($N = 5, 10, 20, 40$). É visível que o comportamento fica mais próximo do esperado para N maior. Note, no entanto, que a quantidade de spins cresce com N^2 .

Sendo assim, uma simulação com $N = 200$ deve ser bastante próxima do esperado teórico. A magnetização média para uma grade de spins de dimensão 200×200 pode ser vista na figura 13.

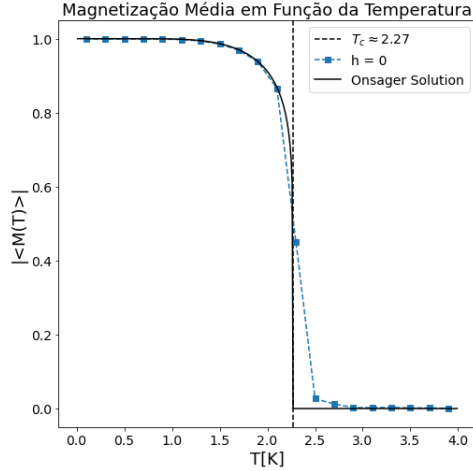


Figura 13: Magnetização média por sítio em função da temperatura para a malha de spins de lado $N = 200$ para $J = K_b = 1$ e $h = 0$. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

I.2 Outros Observáveis

Uma pergunta importante que surge ao analisar o comportamento crítico da magnetização é: Como a transição de fase se manifesta nos outros observáveis? É possível identificá-lo, por exemplo, com medidas de calor específico? Para estudar esse fenômeno, foram calculados a Susceptibilidade Magnética $\chi(T)$, o calor específico $C(T)$ e a energia média por sítio $\langle E \rangle(T)$ para uma configuração de 20×20 spins.

Nas figuras 14 e 15, é possível ver que a transição de fase é manifesta no calor específico e na susceptibilidade magnética como um pico na região da temperatura crítica. Esse fato pode ser utilizado para prever transições de fase em materiais [1], além de ser uma boa forma de estimar o valor real (experimental) da temperatura crítica.

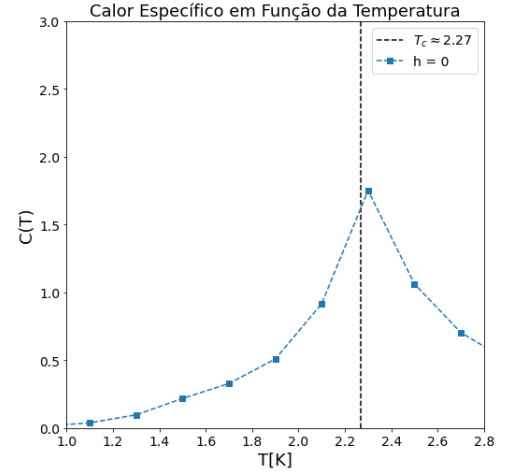


Figura 14: Calor específico em função da temperatura para uma malha de spins de dimensão 20×20 para $h = 0$ e $J = K_b = 1$. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

O comportamento da energia média, no entanto, não parece ser sensível à presença da transição de fase. Mas olhos treinados podem ser capazes de perceber, na figura 16, que a posição da temperatura crítica T_c parece marcar o ponto de inflexão da curva de energia. Isso deveria indicar a presença de um pico (máximo) na derivada primeira da energia em relação ao tempo. Na figura 17, é possível ver que é justamente isso que se observa. Isso é interessante pois pode ser utilizado para estimar a posição real da temperatura crítica.

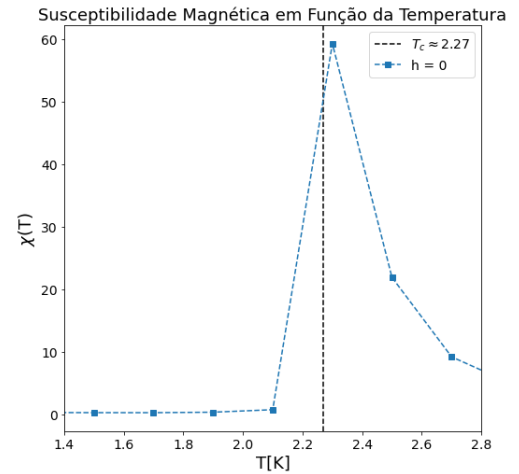


Figura 15: Susceptibilidade magnética em função da temperatura para uma malha de spins de dimensão 20×20 para $h = 0$ e $J = K_b = 1$. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

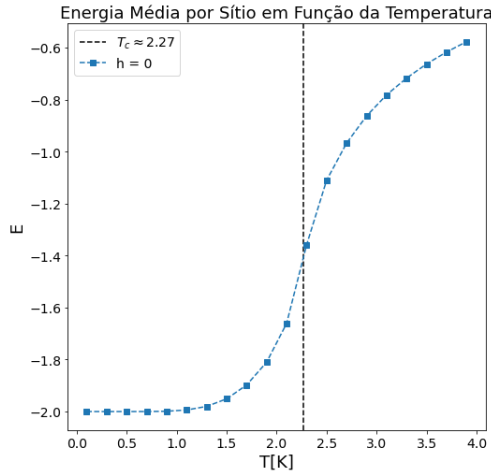


Figura 16: Energia Média em função da temperatura para uma malha de spins de dimensão 20×20 para $h = 0$ e $J = K_b = 1$. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

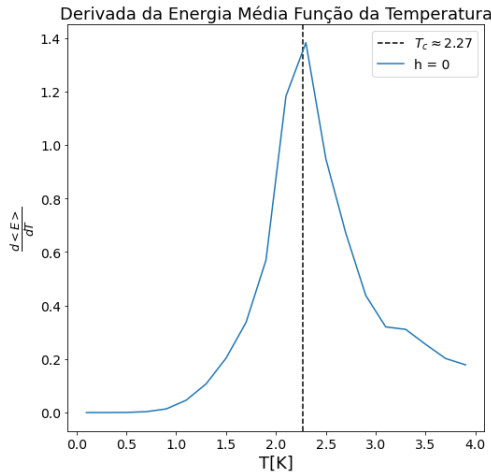


Figura 17: Derivada da Energia Média em função da temperatura para uma malha de spins de dimensão 20×20 para $h = 0$ e $J = K_b = 1$. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

I.3 Estimativa da Temperatura Crítica

A temperatura crítica foi estimada para um sistema simples com malha de 20×20 spins, 2000 varreduras, $h = 0$, $J = K_b = 1$. Essa foi a configuração escolhida pois a intenção do estudo não é obter um valor extremamente preciso da T_c , mas verificar se, para um sistema simples (que pode ser computado em poucos minutos num programa de computador), é possível obter uma estimativa razoável.

O único esforço extra realizado é a tentativa de aumentar a densidade de pontos no gráfico. Para isso, o intervalo

de dt utilizado foi $dT = 0.05$ (metade do que havia sido utilizado para as discussões anteriores).

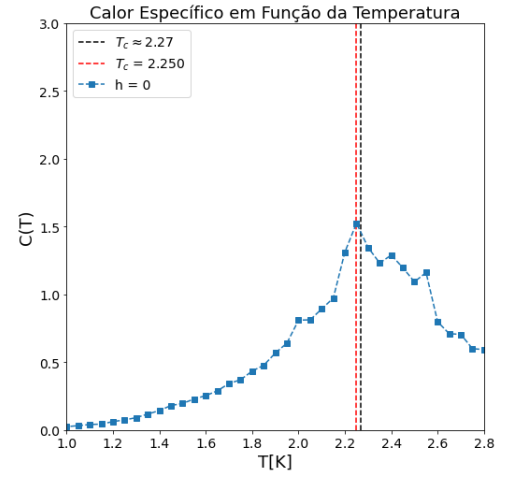


Figura 18: Calor específico em função da temperatura para uma configuração 20×20 de spins não submetidos a campos magnéticos, com $J = K_b = 1$. A reta vermelha vertical representa a estimativa computacional do valor da temperatura crítica. A simulação pelo algoritmo de Metropolis envolveu 1000 varreduras.

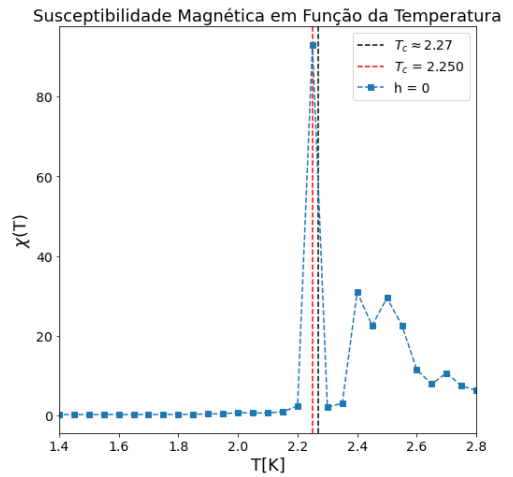


Figura 19: Susceptibilidade magnética em função da temperatura para uma configuração 20×20 de spins não submetidos a campos magnéticos, com $J = K_b = 1$. A reta vermelha vertical representa a estimativa computacional do valor da temperatura crítica. A simulação pelo algoritmo de Metropolis envolveu 1000 varreduras.

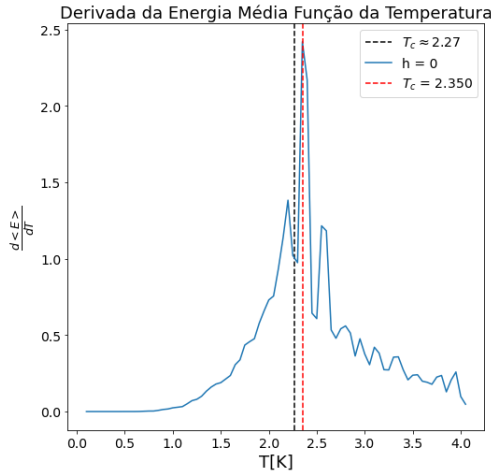


Figura 20: Calor específico em função da temperatura para uma configuração 20×20 de spins não submetidos a campos magnéticos, com $J = K_b = 1$. A reta vermelha vertical representa a estimativa computacional do valor da temperatura crítica. A simulação pelo algoritmo de Metropolis envolveu 1000 varreduras.

Usando como parâmetro a posição do pico no gráfico do calor específico, o valor obtido para a temperatura crítica é $T_c^c = 2.25(2)$, enquanto o valor estimado através da posição do pico na susceptibilidade magnética foi $T_c^s = 2.25(10)$. Finalmente, o valor estimado através da posição do pico da derivada da energia média foi $T_c^E = 2.35(10)$. As incertezas dos valores foram estimadas visualmente baseado na ruidez dos gráficos. Ao fazer a média dos valores obtidos pelos três métodos, temos o valor estimado final $T_c^{\text{estimado}} = 2.28(4)$, que parece bastante compatível com o esperado, principalmente para uma estimativa tão simples.

I.4 A Influência do Campo Magnético

Não poderíamos deixar de explorar o grau de liberdade faltante do nosso estudo: h . Qual será a influência da presença dos campos magnéticos sobre os observáveis?

É visível a grande influência da presença de campo magnético no sistema. A figura 21 indica que mesmo para temperaturas mais altas, o sistema insiste em permanecer se magnetizando, o que era esperado.

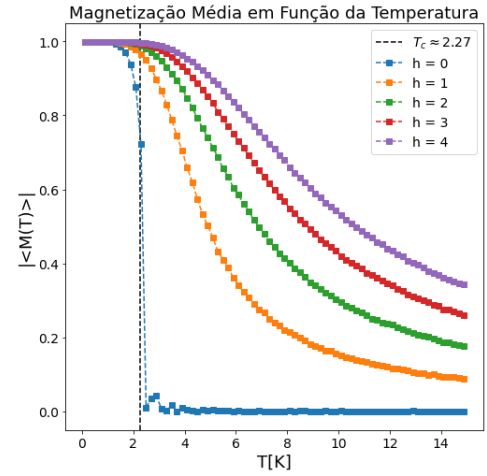


Figura 21: Magnetização média por sítio em função da temperatura para a malha de spins de lado $N = 20$ para $J = K_b = 1$ e $h = 0, 1, 2, 3, 4$. O algoritmo de Metropolis realizou 1000 varreduras.

IV. CONCLUSÃO

O modelo de Ising 2D foi estudado extensivamente utilizando o método computacional conhecido chamado Algoritmo de Metropolis, baseado na técnica de Monte Carlo. Através do estudo computacional, fomos capazes de observar uma variedade de fenômenos físicos interessantes, como a magnetização espontânea de sistemas de spins não submetidos a campos magnéticos. Fomos ainda capazes de estimar o valor da temperatura crítica do modelo de Ising 2D e comparar a estimativa com o valor calculado por Lars Onsager [3]. O valor obtido para a estimativa foi $T_c = 2.28(4)$, e parece estar coerente com o valor encontrado na literatura.

Apesar de muito rico, o modelo de Ising é um modelo de spins bastante simples. É possível estudar outros modelos que envolvem mais graus de liberdade para os spins. Como levando em conta a possibilidade de encontrar spins polarizados em quaisquer direções no plano, ou até mesmo considerar a interação dos spins com outros spins que não fazem parte de sua vizinhança.

REFERÊNCIAS

- [1] Daniel V Schroeder. An introduction to thermal physics, 1999.
- [2] Matheus Phellipe Brasil de Sousa. Expoentes críticos numéricos na rede quadrada para o modelo de ising. B.S. thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2017.

- [3] Ivan de Paula Miranda. A solução de onsager para o modelo de ising 2d: a complexidade do magnetismo quântico.
- [4] Maria Isabel Dias Astros. Testing lorentz invariance emergence in the ising model using monte carlo simulations. Technical report, 2017.

A. MANUAL DO USUÁRIO

O Códido disponível no endereço a seguir **Pasta no Google Drive** é capaz de computar o modelo de Ising 2D para inúmeras diferentes configurações através do método de Metropolis.

GuilhermeDamacenaDeCastro_Projeto3.py

1. `initial_config(N,M)`

Essa função cria uma matriz aleatória preenchida com spins + ou - 1.

Ela recebe dois números inteiros (as dimensões da matriz).

Ela retorna uma matriz (numpy array).

2. `calculate_energy(spins_config, J, h)`

Essa matriz calcula a energia total de uma configuração específica de spins numa malha 2d.

Ela recebe uma matriz (numpy array) chamado `spins_config`, um número `J` (constante de interação entre spins) e o valor do campo magnético `h`.

Ela retorna o valor da energia total.

3. `plot_config(spins_config, name)`

Essa função gera um plot da grade de spins onde cada quadrado preto representa um spin -1, e cada quadrado branco, um spin +1.

Ela recebe uma matriz `spins_config` (configuração) e uma string (`name`) para nomear o plot salvo.

A função não retorna.

4. `delta_e(s, i, j, J, h)`

Calcula a variação de energia causada pela flipagem de um spin. Importante: A matriz que a função recebe deve conter o spin candidato já flipado.

A função recebe uma matriz `s` (configuração atual), duas coordenadas do spin candidato (`i` e `j`), um valor de `J` (constante de interação spin spin e `h`, o valor do campo magnético).

5. `sweep_config(spins_config, J, h, beta, E)`

A função faz uma varredura pela matriz de spins usando o método de Metropolis.

A função recebe uma matriz `spins_config`, um valor `J`, o valor do campo magnético `h`, uma constante `beta` (definido como $1/(K_b T)$, onde T é a temperatura e K_b é a constante de Boltzmann).

A função retorna o valor da nova energia

6. `run_simulation(Nmax, Ts, hs, J, k, N, M, inicio_aleatorio = True)`

Essa função efetivamente roda a simulação. Ela realiza N_{max} varreduras por uma matriz de spins.

Ela recebe uma lista de temperaturas `Ts`, uma lista de campos magnéticos `hs`, um valor de `J`, um valor de `k = K_b`, as dimensões da malha de spins (`N,M`) e uma variável booleana `inicio_aleatorio`. Essa última variável, quando `True`, garante que a condição inicial do sistema de spins seja completamente aleatória. Se for `False`, a condição inicial é todos os spins apontados para cima.

A função retorna 6 itens: `Ts`, `hs`, `EE`, `MM`, `C`, `CHI`

`Ts` é a lista das energias, `hs` é a lista dos campos magnéticos, `EE` é a matriz (contendo as listas) das energias médias por sítio, `MM` é a lista de listas de magnetizações médias por sítio. `C` é a lista de listas de calores específicos e χ é a lista das listas de susceptibilidades magnéticas

7. `mag_onsager(k, J, T)`

Essa função calcula a solução matemática obtida por Onsager para um valor de `k`, `J` e `T`.

A função recebe apenas os valores `k`, `J` e `T`.

A função retorna o valor da magnetização espontânea de Onsager para a dada `T`.

8. `plot_observables(Ts, hs, EE, MM, C, CHI, k, J, lit = True)`

Essa função plota os observáveis.

Ela recebe a lista de temperaturas, as listas de listas de campos magnéticos, de energia média, magnetização média por sítio, calor específico e susceptibilidade magnética. Além disso, ela recebe os valores das constantes k e J . Há ainda uma variável Booleana `lit` que, quando `True`, plota junto aos observáveis a solução prevista por Onsager para a magnetização.

A função não retorna, mas salva figuras.

9. `derive(y, x)`

Essa função calcula a derivada de uma grandeza y em relação à grandeza x .

Ela recebe as duas listas y e x .

Ela retorna uma lista com os valores da derivada para cada x .

10. `find_max_point(y,x)`

Essa função encontra o valor de x para o máximo de y (útil para estimar o valor da temperatura crítica).

Ela recebe duas listas: y e x

Ela retorna o valor de x para o qual y é máximo.

11. `run_grid_simulation(Nmax, T, h, J, k, N, M)`

Essa função roda um algoritmo de Metropolis completo com o objetivo de salvar as figuras da condição inicial e da final.

Ela recebe o número de varreduras N_{max} , a temperatura da simulação T , o campo magnético h , as constantes J e k , e as dimensões da grade de spins N e M .

12. `run_simulation_alt(Nmax, Ts, h, J, k, Ns, inicio_aleatorio = True)`

Equivalente à função `run_simulation`, porém recebe uma lista de dimensões da grade de spins N_s e um valor h de campo magnético apenas.

13. `plot_observables_alt(Ts, Ns, EE, MM, C, CHI, k, J, lit = True)`

Equivalente à função `plot_observables`, porém recebe uma lista de dimensões da grade de spins N_s e um valor h de campo magnético apenas.