

# Modelo de Ising: Uma análise de sistemas magnéticos bidimensionais baseada em resultados de simulações computacionais.

LUCAS DE PAULA OLIVEIRA, 11222179  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

## Resumo

*O presente trabalho se propõe a estudar os fundamentos e a aplicabilidade do Modelo de Ising 2D dentro do contexto de sistemas magnéticos. Foi feita uma revisão dos principais conceitos teóricos referentes e, posteriormente, todos eles foram utilizados para simular sistemas magnéticos com o intuito de estudar as características do alinhamento de spins no contexto de materiais ferromagnéticos. Em particular, deu-se uma atenção especial nos fenômenos da transição de fase e do ciclo de histerese. Todos os resultados obtidos foram coerentes com os esperados de acordo com a solução analítica de Lars Onsager para o Modelo de Ising aplicado a sistemas bidimensionais.*

## 1. INTRODUÇÃO

Todos os materiais à nossa volta possuem propriedades magnéticas, uma vez que todos eles possuem *cargas em movimento* em alguma escala. Apesar disso, na grande maioria dos casos, essas propriedades não se manifestam macroscopicamente de maneira natural. Isso ocorre porque, na natureza, existem apenas dois fenômenos capazes de influir / determinar as propriedades magnéticas de um determinado objeto. São elas:

- Movimento orbital dos elétrons dentro de cada átomo correspondente;
- Propriedade de *spin* dos elétrons, predominante em átomos que contêm *elétrons desemparelhados*.

Para a maior parte dos objetos, as contribuições citadas (as quais podem ser tratadas como contribuições de *dipolo magnético* em primeira aproximação) estão distribuídas de maneira completamente aleatória dentro dos átomos que os compõem. Desse modo, a componente resultante entre todas essas contribuições é nula, e é por isso que esses objetos não apresentam propriedades magnéticas aparentes. Nessas situações, é dito que esses materiais não estão *magnetizados*.

Isso não significa, entretanto, que esses dipolos magnéticos não possam ser alinhados na presença de um determinado campo magnético externo, fazendo com que o respectivo material passe a apresentar propriedades magnéticas relevantes (i.e., passe a estar magnetizado). [2]

Essencialmente, dentro desse contexto, existem duas classificações possíveis de materiais: *materiais diamagnéticos* e *materiais paramagnéticos*.

Os materiais diamagnéticos são aqueles cujas contribuições de dipolo magnético vêm puramente das órbitas eletrônicas presentes em cada átomo, e são caracterizados por apresentarem uma tendência de magnetização no sentido contrário ao do campo magnético externo aplicado. [2]

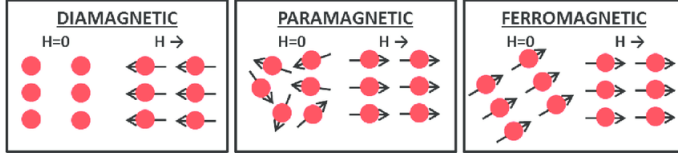
Os materiais paramagnéticos, por outro lado, são materiais nos quais as contribuições de dipolo magnético vêm de spins de elétrons desemparelhados. Diferentemente dos materiais diamagnéticos, os materiais paramagnéticos apresentam uma tendência de magnetização que ocorre no mesmo sentido do campo magnético externo aplicado. [2]

O diamagnetismo é observado principalmente em materiais constituídos por átomos com número par de elétrons, nos quais o paramagnetismo está normalmente ausente. As propriedades paramagnéticas são muito mais intensas do que as diamagnéticas. [2]

É importante destacar também que tanto os materiais diamagnéticos quanto os paramagnéticos perdem suas magnetizações quando o campo magnético externo é desligado, ou seja, os dipolos internos voltam a apresentar uma configuração desordenada.

Existem na natureza, entretanto, alguns poucos materiais para os quais a magnetização pode vir a ocorrer de maneira natural, independentemente da presença ou não de campo magnético externo. Essa distinta classe de materiais possui também uma propriedade bastante inte-

ressante e que, de fato, compõe a base de muitas aplicações práticas, que é a capacidade de reter a magnetização média mesmo após a remoção do campo magnético externo. Esses materiais são chamados *materiais ferromagnéticos* [2], e serão os protagonistas do presente estudo. Exemplos típicos de materiais ferromagnéticos são o Ferro (Fe), o Níquel (Ni), o Cobalto (Co) e ligas metálicas em geral formadas por algum desses três elementos [2].



**Figura 1:** Representação esquemática da distribuição de dipolos magnéticos em materiais diamagnéticos, paramagnéticos e diamagnéticos, assim como das correspondentes respostas à aplicação de campo magnético externo. Figura disponível [nessa página da web](#)

Assim como o paramagnetismo, o ferromagnetismo também é uma consequência de dipolos magnéticos originados por spins de elétrons desemparelhados. A grande diferença entre essa última classe de materiais e a primeira é que os dipolos internos *tendem a apontar na mesma direção dos seus vizinhos* [2].

A origem dessa tendência de alinhamento se dá a partir de fenômenos quânticos que fogem ao escopo do presente trabalho. Apesar dessa dificuldade, existe atualmente um modelo simplificado com alto grau de aplicabilidade e que é amplamente aceito dentro da comunidade científica. Esse modelo se propõe justamente a estudar o comportamento dos spins dentro de materiais ferromagnéticos típicos, e se deve ao físico alemão Ernst Ising (1900 - 1998). De maneira geral, o *Modelo de Ising* considera que os dipolos magnéticos (ou simplesmente spins, nesse caso) do material em estudo só podem se alinhar em uma configuração paralela ou anti-paralela ao eixo preferencial de magnetização do objeto, e despreza quaisquer tipos de interação de longo alcance. Ou seja, *a tendência de alinhamento de cada dipolo magnético do material depende apenas da configuração dos dipolos magnéticos vizinhos* [5].

Devido à sua simplicidade, o Modelo de Ising vem sendo muito aplicado dentro da *Mecânica Estatística* no estudo do fenômeno da *transições de fase* e na análise de diversos outros sistemas cujas variáveis relevantes podem assumir apenas dois valores (assim como os spins, no caso de sistemas magnéticos). [4]

Dentro do contexto do ferromagnetismo, o modelo é formulado da seguinte maneira: dado um sistema com  $N$

spins atômicos construído de tal maneira que cada spin  $s_i$  possa assumir somente valores  $\pm 1$  (alinhamento paralelo ou anti-paralelo com relação ao eixo preferencial de magnetização), a energia total do sistema é parametrizada pelo *Hamiltoniano de Ising* (1)

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

sendo  $\epsilon$  a constante de energia associada à interação entre cada spin e  $h$  o parâmetro de interação entre o campo magnético externo e os spins do sistema.

Todo o comportamento térmico desse sistema (suposto em equilíbrio térmico à temperatura  $T$ ) pode ser calculado com base na função de partição  $Z$ , dada por:

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta U(s_i)} = \sum_{\{s_i\}} e^{-\frac{U(s_i)}{k_B T}} \quad (2)$$

na qual  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $U(s_i)$  é a energia total do sistema associada à configuração de spins  $\{s_i\}$ , e a soma é feita sobre todas as configurações de spin possíveis.

A função de partição  $Z$ , entretanto, pode ser muito complicada de ser determinada. Para um sistema unidimensional com  $N$  spins atômicos, por exemplo, haveria um total de  $2^N$  configurações possíveis, uma vez que cada spin possui 2 orientações permitidas. Portanto  $Z$  encerraria um total de  $2^N$  termos somados. No caso particular do sistema unidimensional, entretanto, a função de partição possui solução analítica conhecida, e é tal que a magnetização média do sistema correspondente pode ser formulada da seguinte maneira:

$$\langle m(T, h) \rangle = \frac{\sinh \beta h}{(\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta \epsilon})^{1/2}} \quad (3)$$

sendo a constante  $\beta$  definida por  $\beta = \frac{1}{k_B T}$

O caso bidimensional, por sua vez, envolveria um total de  $(2^N)^N$  somas para a determinação  $Z$ , o que é totalmente inviável de se fazer manualmente mesmo para os computadores mais rápidos já construídos. Ainda assim existe uma solução analítica conhecida, proposta em 1944 por Lars Onsager (1906 - 1976), para o caso de sistemas livres da ação de um campo magnético externo [4]. De acordo com a solução analítica da função de partição proposta por Onsager (provada matematicamente alguns anos mais tarde pelo físico C.N. Yang [6]), o sistema deveria apresentar uma magnetização espontânea média dada pela expressão (4):

$$\langle m(T) \rangle = (1 - [\sinh(2\beta \epsilon_1) \sinh(2\beta \epsilon_2)]^{-2})^{\frac{1}{8}} \quad (4)$$

na qual  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  representam os parâmetros de energia associados a interações horizontais e verticais, respectivamente.

Ainda de acordo com Onsager, o sistema deveria apresentar uma *transição de fase* à temperatura crítica  $T_c$  (também denominada “Temperatura de Curie”) dada por:

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.27 \quad (5)$$

em unidades de medida tais que  $k_B/\epsilon = 1$ .

Até onde se sabe, o caso tridimensional não possui nenhuma solução analítica conhecida.

Apesar de toda a dificuldade associada à determinação da função de partição  $Z$  analiticamente, ela pode ser obtida via aproximações numéricas através do *Algoritmo de Metropolis com condições periódicas de contorno*, proposto inicialmente pelo cientista americano Nicholas Metropolis, em um artigo de 1953 [3]. Para a grande maioria das aplicações práticas (e, em particular, para o Modelo de Ising bidimensional) as simulações numéricas baseadas nesse algoritmo (também chamadas *Simulações de Monte Carlo*) fornecem uma excelente aproximação para o comportamento geral do sistema em estudo.

De modo geral, o Algoritmo de Metrópolis consiste numa aplicação prática do fato de que os fatores de Boltzmann associados a cada mudança de estado no sistema só dependem do estado inicial e do estado final [5]. Desse modo, seu método de funcionamento segue a seguinte receita:

1. Tome um spin aleatório do sistema e considere a possibilidade de inverter sua orientação;
2. Calcule a variação de energia  $\Delta U$  associada à alteração feita no spin escolhido;
3. Se  $\Delta U \leq 0$ , então a energia total do sistema ou seria reduzida ou permaneceria inalterada. Nesse caso a alteração deve ser mantida;
4. Se  $\Delta U > 0$ , isso significa que a energia do sistema iria aumentar caso a alteração fosse feita. Calcule o fator de Boltzmann  $e^{-\beta\Delta U}$  associado à probabilidade dessa alteração ocorrer ou não, e decida aleatoriamente se a mudança de fato deve ser feita;
5. Repita o processo até que todos os spins do sistema tenham sido escolhidos aleatoriamente.

Em vista dessas discussões, portanto, o presente trabalho se propõe a estudar o comportamento de sistemas bi-dimensionais de spins considerando a aplicação direta do Modelo de Ising 2D e do Algoritmo de Metrópolis. Após

diversas verificações experimentais e testes ao longo dos anos, notou-se que sistemas 2D sujeitos ao modelo apresentado se comportam de maneira muito semelhante aos materiais ferromagnéticos típicos conhecidos. Portanto, serão exploradas as seguintes características principais:

- O fenômeno da transição de fase
- O fenômeno de histerese em materiais ferromagnéticos

## 2. MANUAL DO CÓDIGO

As linhas de código utilizadas para a confecção do presente estudo, construídas no ambiente de programação “Google Colab”, encontram-se disponíveis na íntegra [neste endereço](#). Um arquivo do tipo “.py” com os mesmos códigos, mas organizados de maneira compacta e prontos para serem executados está sendo disponibilizado em conjunto com esse documento.

Essencialmente, o código em questão foi completamente estruturado com base em 4 funções principais. São elas:

- *cria\_sistema*
- *cria\_figura*
- *atualiza\_Metropolis*
- *cria\_gif*

Como funções secundárias (i.e., que não são utilizadas na prática), mas igualmente importantes e fundamentais para o desempenho da função *atualiza\_metropolis* ( pilar de funcionamento das simulações), tem-se:

- *calcula\_DeltaE*
- *verifica\_flip*

A função *cria\_sistema* é a mais simples. Ela toma como parâmetros somente a dimensão  $N$  do sistema e retorna como saída uma matriz  $N \times N$  de spins “up” e “down” randomicamente distribuídos.

Ao mesmo passo, a função *cria\_figura* recebe como entrada apenas uma matriz  $M$  de spins e retorna como saída uma representação gráfica do sistema inserido em um plano quadriculado. Quadrados preenchidos com a cor preta representam spins “up”( +1), enquanto quadrados brancos (não preenchidos) representam spins “down”( -1). Essa função é puramente complementar. A princípio é possível fazer todas as análises necessárias sem utilizá-la, contudo ela é bastante útil e permite uma visualização dinâmica da “evolução temporal” do sistema de spins

fornecido. Dentro dela encontra-se anexada a função *atualiza\_Metropolis* (que será discutida mais adiante), responsável por fazer a atualização dos spins a cada frame do gif. Seus parâmetros de entrada são os parâmetros associados à simulação do Modelo de Ising: a temperatura  $T$  do sistema, o parâmetro de energia  $\epsilon$  e o parâmetro de campo magnético  $h$ ; a matriz de spins  $M$ ; a quantidade de frames (ou varreduras de atualização do sistema)  $Nvar$  e, por fim, um string representando o nome do arquivo ".gif" que será criado.

**Atenção!** É muito importante checar a pasta/diretório no qual o código está sendo executado. A função *cria\_gif* salva diversas imagens para construir cada frame do gif, por isso é preciso tomar cuidado com a quantidade de frames/varreduras inserida como parâmetro e se lembrar de apagar todos os arquivos gerados antes de criar um novo gif. Além disso, pode ser necessária a instalação da biblioteca python "imageio" caso o usuário não a tenha previamente instalada no computador ou não esteja usando a plataforma do Google Colab para executar os códigos.

A função *atualiza\_Metropolis* tem como parâmetros de entrada a temperatura  $T$  do sistema, o parâmetro de energia  $\epsilon$ , o parâmetro de campo magnético  $h$  e a matriz  $M$  de spins. Seu trabalho é percorrer randomicamente a matriz fornecida, escolhendo spins aleatórios do sistema, e verificando se o sentido de cada um deles pode ser alterado ou não de acordo com a variação de energia associada ao processo. Para a execução dessa tarefa, entram como auxiliares as funções *calcula\_DeltaE* e *verifica\_flip*.

O cálculo da variação de energia associado a um determinado "flip" de spin seria muito custoso do ponto de vista computacional se a cada vez que o "flip" ocorresse o computador precisasse recalcular a energia completa do sistema e efetuar a diferença  $\Delta E = E_{novo} - E_{antigo}$ . Contudo, essa variação pode ser calculada analiticamente para o "flip" de um spin genérico  $\sigma_{km}$  (linha  $k$ , coluna  $m$ ) da matriz, e o resultado pode ser utilizado para salvar grande parte dos esforços computacionais. Pode-se provar que a variação total de energia só depende da configuração dos spins vizinhos a  $\sigma_{km}$  e dos parâmetros  $\epsilon$  e  $h$ , sendo fornecida pela seguinte expressão:

$$\Delta E = 2 \cdot \sigma_{km} \cdot \{ \epsilon \cdot [\sigma_{k(m+1)} + \sigma_{k(m-1)} + \sigma_{(k-1)m} + \sigma_{(k+1)m}] + h \} \quad (6)$$

É justamente desse resultado que a função *calcula\_DeltaE* se aproveita para economizar tempo e memória. Em vista disso, seus parâmetros de entrada são: os parâmetros  $\epsilon$  e  $h$ ; a matriz  $M$  de spins; e os índices

$i\_flip$  e  $j\_flip$  da linha e da coluna do spin a ser invertido ("flipado").

Uma vez calculada a variação de energia associada ao "flip" de um spin genérico escolhido aleatoriamente pela função *atualiza\_Metropolis*, a função *verifica\_flip* decide se o spin em questão pode ser invertido ou não de acordo com a receita do algoritmo de Metropolis apresentada no final da seção 1.

Conforme apontado anteriormente, as funções *calcula\_DeltaE* e *verifica\_flip* não estarão em contato direto com o usuário, mas era importante entender o funcionamento de cada uma delas para que a lógica por trás do funcionamento da função *atualiza\_Metropolis*, que é de fato a função com a qual se tem um maior contato, pudesse ser compreendida.

Vale enfatizar também que a função *atualiza\_Metropolis* não gera novas cópias da matriz inicialmente fornecida, ela faz alterações diretamente na variável bidimensional fornecida.

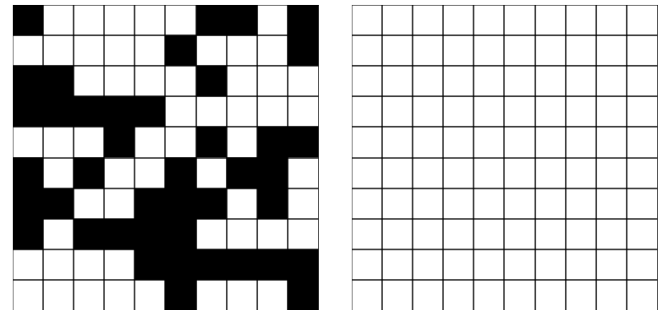
```
eps = 1 # parâmetro de energia
h = 0 # parâmetro de campo magnético
N = 10 # dimensão do sistema
T = 1 # temperatura do sistema
Nvar = 100 # número de varreduras / atualizações da simulação

sist = cria_sistema(N) # cria um sistema randômico de spins de dimensão NxN
cria_figura(sist) # constrói uma figura representativa do sistema criado
plt.show() # apresenta a figura

cria_gif(T,eps,h,sist,Nvar,'gif_teste') # simula a evolução do sistema ao longo de Nvar varreduras de atualização
# e retorna em um gif

cria_figura(sist) # constrói uma figura do sistema após passar por todas as atualizações do gif
plt.show() # apresenta a figura
```

Figura 2: Exemplo básico de utilização do código construído



(a) Sistema inicial de spins gerado (b) Sistema final obtido após todas as atualizações executadas pela função *cria\_gif*.

Figura 3: Saídas obtidas para as linhas de código apresentadas na Figura 2.

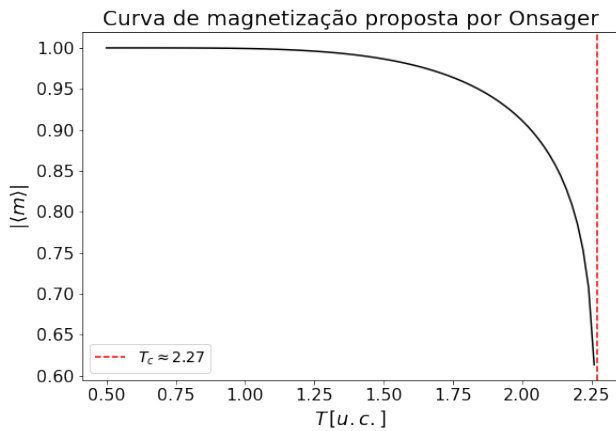
É importante lembrar que a função *cria\_gif* implementa loops de atualização baseados na função *atualiza\_Metropolis* automaticamente. Não há necessidade de se preocupar com essas atualizações caso o interesse seja puramente

avaliar a "evolução temporal" (i.e., a atualização dos spins a cada iteração) de um sistema qualquer criado. Contudo, caso haja necessidade de efetuar análises mais precisas / sofisticadas (tais como as desenvolvidas no corpo desse documento), a chamada da função *atualiza\_Metropolis* deve ser feita manualmente através de loops, tal como desenvolvido no arquivo ".py" disponibilizado.

O gif criado com as linhas de código apresentadas na Figura 2 pode ser visualizado [neste endereço](#).

### 3. O FENÔMENO DA TRANSIÇÃO DE FASE

De acordo com o resultado analítico proposto por Lars Onsager (4), sistemas bidimensionais de spins sujeitos ao Modelo de Ising devem apresentar uma *transição de fase* a partir da temperatura crítica  $T_c \approx 2.27$  em unidades  $k_B/\epsilon = 1$  (5). A partir desse momento, todas as quantidades relevantes ( $T$ ,  $\epsilon$ ,  $h$ ) serão apresentadas nesse sistema de unidades. Para referenciá-lo, será utilizada a sigla *u.c.* (unidades características).



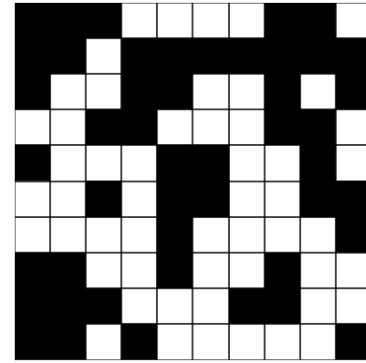
**Figura 4:** Representação gráfica da curva analítica de magnetização espontânea (4) para um sistema de spins isotrópico ( $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ ) sujeito a um campo magnético externo nulo ( $h = 0$ ).

É possível observar que a solução diverge para temperaturas superiores a  $T_c$  e, portanto, quaisquer sistemas bidimensionais formados não devem apresentar nenhuma magnetização resultante. Ou seja,  $T_c$  é a *temperatura a partir da qual materiais ferromagnéticos deixam de apresentar a tendência típica de alinhamento de spins e passam a se comportar como materiais paramagnéticos*, nos quais os spins sempre tendem a permanecer completamente desordenados.

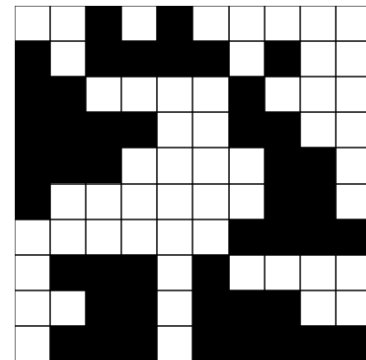
Vale destacar ainda que, de acordo com a solução proposta, essa mudança de comportamento deve ser abrupta. Não existem "temperaturas intermediárias" de transição do comportamento ferromagnético para o paramagnético

e vice-versa. Ou o material se comporta como ferromagnético, ou se comporta como paramagnético. Essa é uma característica típica e já muito bem conhecida dos fenômenos de transição de fase, e é justamente por esse motivo que a divergência da solução analítica observada na Figura 4 é nomeada como tal.

Como uma forma de verificação prática das proposições de Onsager, utilizou-se o código descrito na seção 2 para simular o comportamento de um sistema bidimensional de dimensões  $10 \times 10$  após 1000 "varreduras de atualização", todas efetuadas a partir de um *mesmo sistema inicial de spins*.

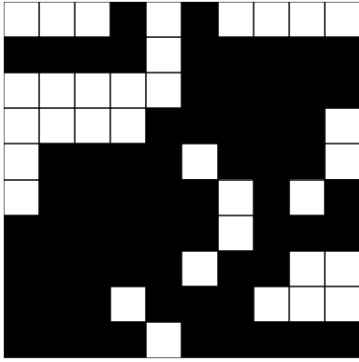


**Figura 5:** Sistema inicial de spins criado randomicamente para o estudo das simulações. Dimensão do sistema:  $10 \times 10$



**Figura 6:** Configuração final de spins obtida após 100 varreduras de atualização do sistema apresentado na Figura 5. Parâmetros de simulação:  $T = 9 \text{ u.c.}$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $h = 0$ ,  $N_{var} = 1000$ .

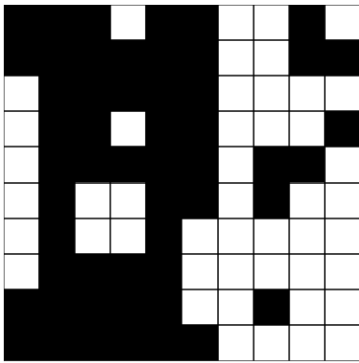




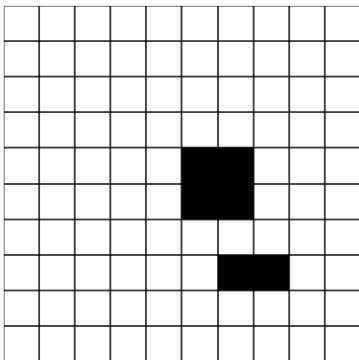
**Figura 7:** Configuração final de spins obtida após 100 varreduras de atualização do sistema apresentado na Figura 5. Parâmetros de simulação:  $T = 6 \text{ u.c.}$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $h = 0$ ,  $Nvar = 1000$ .



**Figura 10:** Configuração final de spins obtida após 100 varreduras de atualização do sistema apresentado na Figura 5. Parâmetros de simulação:  $T = 1 \text{ u.c.}$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $h = 0$ ,  $Nvar = 1000$ .



**Figura 8:** Configuração final de spins obtida após 100 varreduras de atualização do sistema apresentado na Figura 5. Parâmetros de simulação:  $T = 3 \text{ u.c.}$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $h = 0$ ,  $Nvar = 1000$ .



**Figura 9:** Configuração final de spins obtida após 100 varreduras de atualização do sistema apresentado na Figura 5. Parâmetros de simulação:  $T = 2 \text{ u.c.}$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $h = 0$ ,  $Nvar = 1000$ .

A sequência de atualizações pelas quais o sistema da Figura 5 passou até chegar nas configurações finais apresentadas nas figuras 6, 7, 8, 9 e 10 foi representada de maneira animada em arquivos ".gif" disponíveis [neste endereço](#).

O primeiro ponto importante que deve ser ressaltado é que todas as simulações foram feitas utilizando o parâmetro de energia  $\epsilon$  como sendo igual a 1. O código foi estruturado em unidades tais que  $k_B = 1$ , portanto a escolha de parâmetro  $\epsilon = 1$  faz com que todos os resultados obtidos se encaixem na condição  $k_B/\epsilon = 1$  (unidades características). Dessa maneira, a expectativa seria de que o sistema simulado apresentasse uma transição de fase em  $T_c \approx 2.27$ .

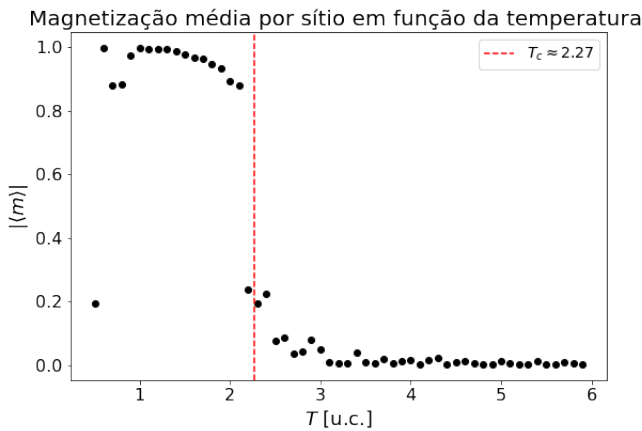
A primeira sequência de configurações (figuras 6 até 8) estão completamente dentro do esperado. Os spins do sistema se organizaram de uma maneira totalmente randômica de modo que não se pode afirmar com clareza se o sistema final está magnetizado ou não. É possível observar a formação de *domínios magnéticos*, entretanto o tamanho relativo dos domínios de spin "up" (cor preta) é muito semelhante ao dos domínios de spin "down" (cor branca), de modo que a magnetização resultante, se existir, terá um valor médio muito próximo de 0.

Se o leitor verificar os gifs de evolução a cada varredura, irá observar que mesmo havendo a formação de domínios magnéticos, a sequência de atualizações nesse regime de temperaturas é extremamente caótica. A cada passo o sistema atualiza todos os spins e inverte completamente a predominância de domínios magnéticos (quando há). As configurações observadas, portanto, não são resultados estáveis. Se uma nova simulação fosse executada com exatamente os mesmos parâmetros, mas com uma quantidade total de 101 varreduras (por exemplo), o sistema final teria configurações completamente distintas daquelas observadas nas figuras em questão.

As configurações apresentadas nas figuras 9 e 10, por outro lado, apresentam domínios magnéticos claramente evidentes. No caso da Figura 9, a predominância magnética é de spins "down", enquanto que no caso da Figura 9 a predominância magnética é de spins "up". Diferentemente das configurações apresentadas na sequência de figuras anterior, esses resultados são estáveis no sentido de que se uma nova simulação fosse executada, a probabilidade de o sistema ser observado com magnetização não nula (seja no sentido positivo, seja no sentido negativo) é muito grande.

Nota-se que até a temperatura  $T = 3 u.c.$  o sistema estudado parecia não apresentar magnetização resultante (i.e., possuía características típicas paramagnéticas), enquanto que para temperaturas abaixo de  $2 u.c.$  a presença de domínios magnéticos dominantes era completamente evidente (característica típica ferromagnética). Esse resultado, por sua vez, está em concordância com as proposições de Onsager acerca da transição de fase no Modelo de Ising aplicado a sistemas bidimensionais.

Apesar da concordância, esses primeiros resultados são preliminares e apenas indicam que o modelo teórico e o código construído estão em conformidade. Uma maneira de verificar explicitamente a solução analítica de Onsager é construir um gráfico que represente a curva  $\langle |m| \rangle$  para que conclusões mais precisas e quantitativas possam ser elaboradas.



**Figura 11:** Curva de magnetização média em função da temperatura do sistema. Parâmetros de simulação:  $\epsilon = 1$ ,  $h = 0$ ,  $N = 10$ ,  $Nvar = 1000$ .

De fato, o comportamento da magnetização média de spins apresentado na Figura 13 acima é bastante semelhante ao esperado de acordo com a solução de Onsager (4).

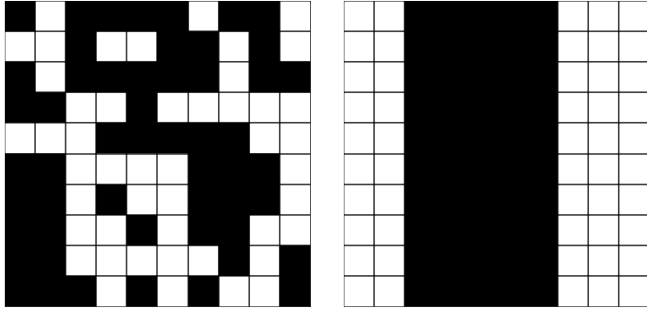
Antes de partir para análises posteriores é importante

fazer uma observação. Há um ponto localizado em uma temperatura abaixo de  $1 u.c.$  que está em completo desacordo com o modelo teórico proposto por Onsager. Apesar desse dado levantar uma suspeita de que haja algum problema com o código ou que o sistema não tenha sido simulado da maneira correta, a aparente violação do modelo teórico é, de fato, apenas aparente.

O Algoritmo de Metropolis descrito na seção 1 é bastante eficiente em gerar estados de spins cujas distribuições de probabilidade estão em acordo com a estatística de Boltzmann, poupando assim uma grande quantidade de poder computacional e tornando a simulação do Modelo de Ising 2D possível de ser efetuada na prática. Contudo, as conclusões subsequentes desse algoritmo na descrição de sistemas de spins são válidas *desde que sua execução tenha sido feita para uma quantidade muito grande (tendendo ao infinito) de passos / varreduras*, de modo que todas as subconfigurações possíveis de spins tenham a chance de serem testadas.

Mesmo que a quantidade implementada de varreduras para essa simulação (1000) seja um número razoavelmente grande, claramente não é uma boa aproximação para uma quantidade "infinita" de passos. Especialmente para baixas temperaturas, portanto, podem aparecer situações nas quais o algoritmo leva o sistema inicial para um *estado metaestável* muito rapidamente, de modo que seria necessário um número de passos muito maior para que o sistema entrasse em equilíbrio e assumisse uma determinada magnetização por sítio não nula próxima do valor 1 (que é o valor esperado) [5].

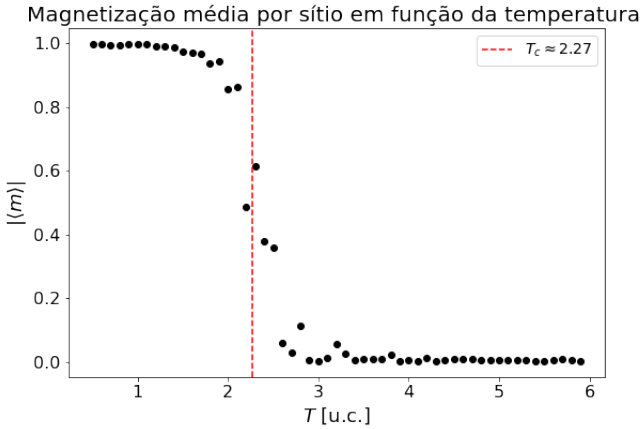
Mesmo nesses casos (a princípio inconsistentes), o Algoritmo de Metropolis ainda apresenta um vínculo com sistemas físicos reais. Pode-se pensar, por exemplo, que seria o caso de um sistema particular que *ainda não teve* tempo suficiente para explorar todos os seus microestados de energia possíveis, de tal forma que seria necessário um *tempo de relaxação* muito grande até que equilíbrio termodinâmico completo fosse atingido. [5]



(a) Sistema inicial de spins gerado randomicamente com dimensão 1000 varreduras de atualização. 10x10. (b) Estado final do sistema após 1000 varreduras de atualização. Cálculo da magnetização média por sítio:  $|\langle m \rangle| = 0$ . Parâmetros de simulação:  $T = 0.5 u.c.$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $h = 0$ ,  $Nvar = 1000$ .

**Figura 12:** Exemplo de visualização do fenômeno de metaestabilidade observado no gráfico da Figura 11

Embora seja um fenômeno bastante curioso e interessante do ponto de vista físico, a metaestabilidade possui uma probabilidade pequena de acontecer considerando a quantidade de varreduras que vem sendo implementada nas simulações até então. Em uma nova simulação, considerando os mesmos parâmetros utilizados na confecção da Figura 11, já não foi possível observar o fenômeno.



**Figura 13:** Curva de magnetização média em função da temperatura do sistema. Parâmetros de simulação:  $\epsilon = 1$ ,  $h = 0$ ,  $N = 10$ ,  $Nvar = 1000$ .

Todos os resultados vistos até o momento corroboram o fato de que, à temperatura  $T_c \approx 2.27$  (em unidades  $k_B/\epsilon = 1$ ), o Modelo de Ising 2D aplicado a sistemas de spins sofre uma transição de fase. Conforme já mencionado anteriormente, dentro do contexto desse estudo a transição de fase representa a alteração no comportamento

dos spins do sistema: para temperaturas abaixo de  $T_c$  são observadas características totalmente ferromagnéticas enquanto que, para temperaturas acima de  $T_c$ , são verificadas características típicas paramagnéticas.

Tal fenômeno, entretanto, não é observado no Modelo de Ising aplicado a *sistemas unidimensionais de spins*. No caso dos sistemas unidimensionais, considerando a ausência de campo magnético externo, a função de partição no limite  $N \rightarrow \infty$  (sendo  $N$ , nesse situação, simplesmente a *quantidade de spins* do sistema 1D) é dada por [5]:

$$Z \approx [2 \cosh(\beta\epsilon)]^N \quad (7)$$

e, portanto, a energia média do sistema [5]:

$$\bar{U} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z) = -N\epsilon \tanh \beta\epsilon \quad (8)$$

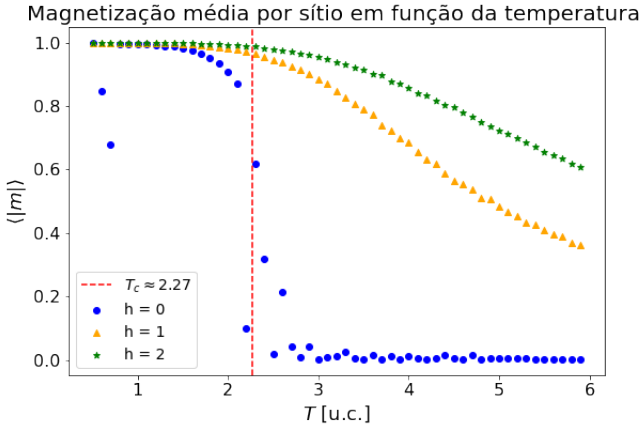
No limite em que  $T \rightarrow \infty$ ,  $\bar{U} \rightarrow 0$  e, no limite em que  $T \rightarrow 0$ ,  $\bar{U} \rightarrow -N\epsilon$  (sistema em equilíbrio estável). Mas o ponto importante a se destacar aqui é que  $\bar{U}$  é uma *função suave* da temperatura  $T$ . À medida que  $T$  aumenta, a desordem no sistema aumenta e, inversamente, à medida que  $T$  diminui o sistema se torna cada vez mais ordenado. Não existe uma temperatura específica além da qual a desordem predomina (comportamento típico paramagnético) e abaixo da qual o alinhamento ordenado é predominante (comportamento típico ferromagnético). Em outras palavras: o Modelo de Ising unidimensional não possui transição de fase e, nesse sentido, não se comporta como um material ferromagnético realista.

#### 4. A SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA E O FENÔMENO DA *histerese*

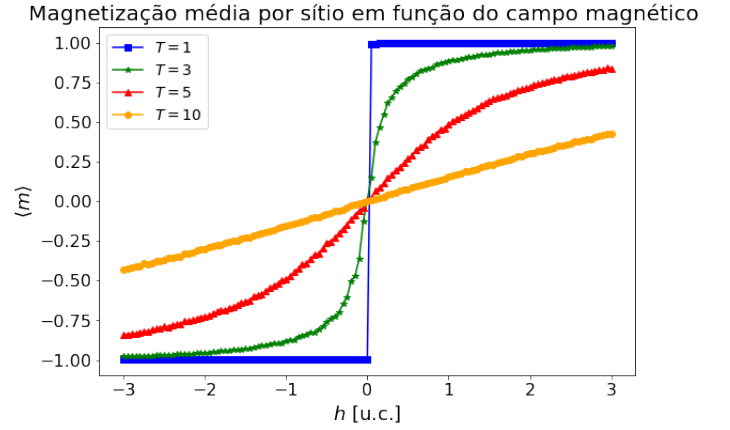
Essa seção se dedica especificamente à análise da resposta dos materiais ferromagnéticos (descritos pelo Modelo de Ising 2D) a campos magnéticos externos.

Seguindo, inicialmente, a mesma lógica das investigações apresentadas na seção anterior, uma primeira abordagem que pode ser tomada é fazer uma verificação de como a magnetização do sistema evolui com o aumento de temperatura se houverem campos magnéticos externos sendo aplicados.





**Figura 14:** Curva de magnetização média em função da temperatura do sistema para diferentes parâmetros de campo magnético. Parâmetros de simulação:  $\epsilon = 1$ ,  $N = 10$ ,  $Nvar = 1000$ .



**Figura 15:** Curva de magnetização média em função do campo magnético externo para diferentes temperaturas do sistema. Parâmetros de simulação:  $N = 10$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $Nvar = 1000$ .

A primeira característica que se sobressai é o fato de que a transição de fase do sistema deixa de ser um evento abrupto (e, portanto, não faz mais sentido usar essa nomenclatura). Dada a forte tendência de alinhamento dos spins do material entre si mesmos e entre eles e o campo magnético externo, a queda da magnetização média agora passa a ocorrer gradualmente com os incrementos de temperatura. É como se o campo magnético externo acrescentasse uma certa inércia aos spins, tornando mais difícil o aparecimento de características típicas paramagnéticas ( $|\langle m \rangle| \rightarrow 0$ ).

Uma segunda abordagem possível para a análise em questão pode ser inverter o padrão do gráfico apresentado na Figura 14, verificando portanto o comportamento da magnetização não em função da temperatura para diferentes campos magnéticos, mas sim em função dos campos magnéticos para diferentes temperaturas de equilíbrio.

Mesmo a transição de fase não sendo mais um fato observável, o sistema ainda assim apresenta fortes características ferromagnéticas para temperaturas inferiores à temperatura crítica.

À temperatura  $T = 1 \text{ u.c.}$ , por exemplo, que representa uma temperatura pequena dentro da escala de trabalho, observa-se que mesmo campos magnéticos  $\sim 10^{-1}$  já são capazes de magnetizar o sistema de maneira muito intensa. Quando o material atinge uma magnetização resultante não nula apreciável de tal forma que seja possível identificar suas propriedades magnéticas mesmo no âmbito macroscópico ( $\langle m \rangle \approx 1$ ), é dito que este atingiu um *estado de saturação*.

Acima da temperatura crítica ( $3 \text{ u.c.}$  e  $5 \text{ u.c.}$ ), por outro lado, é possível verificar uma certa resistência à magnetização: o sistema evolui gradualmente entre estados de magnetização não nulos até atingir a *saturação* em  $\langle m \rangle = \pm 1$ . Se a temperatura estiver muito acima da temperatura crítica ( $10 \text{ u.c.}$ ), por fim, a desordem predomina e, dentro do intervalo de intensidades avaliado para o campo magnético externo  $h$ , o sistema não consegue atingir o estado de saturação.

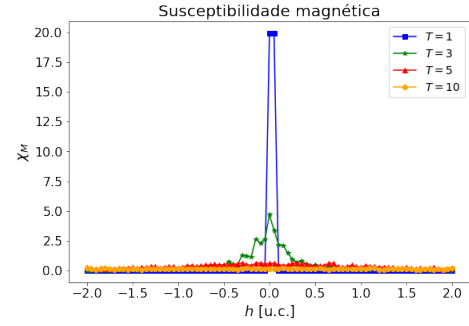
Aqui vale fazer um comentário importante. A classificação dos diferentes tipos de materiais de acordo com suas propriedades magnéticas descritas na seção 1 se dá com base na análise da resposta que cada um deles fornece ao campo magnético externo aplicado. Essa avaliação é feita a partir de uma quantidade muito aplicada / discutida dentro do contexto da física de materiais, a *susceptibilidade magnética*  $\chi_M$ .

$$\chi_M = \frac{dM}{dh}$$

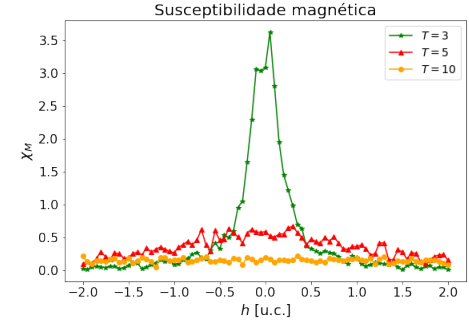
Em geral, no caso dos materiais paramagnéticos e diamagnéticos, a resposta ao campo externo é muito fraca e, portanto, o comportamento predominante da curva  $M \times h$  é essencialmente linear. Isso faz com que a quantidade  $\chi_M$  para esses materiais seja, de fato, uma constante para a grande maioria das aplicações práticas [1].

Os materiais ferromagnéticos, por outro lado, além de possuírem uma forte tendência de alinhamento de seus dipolos magnéticos, se diferenciam também dos materiais para e diamagnéticos pelo fato de apresentarem uma *resposta não linear* à aplicação de campos magnéticos externos. Esse comportamento é observado explicitamente no gráfico da Figura 15. Para temperaturas suficientemente baixas de modo que a desordem do sistema esteja sob controle (3 u.c. e 5 u.c.), existem campos magnéticos para os quais a resposta do material é essencialmente linear (região  $-1 < h < 1$ ). Contudo, se a intensidade do campo magnético externo continua a aumentar o sistema atinge o estado de saturação e sua resposta ao campo externo deixa de ser linear. O caso da temperatura 1 u.c. é um caso particular no qual o grau de desordem no sistema é tão baixo que o estado de saturação é rapidamente atingido, não havendo portanto intervalo de comportamento linear.

É importante destacar, entretanto, que se a temperatura for suficientemente grande de modo que a desordem no sistema seja predominante, a resposta observada no gráfico da Figura 15 é essencialmente linear: o material ferromagnético se comporta como um material para/diamagnético.



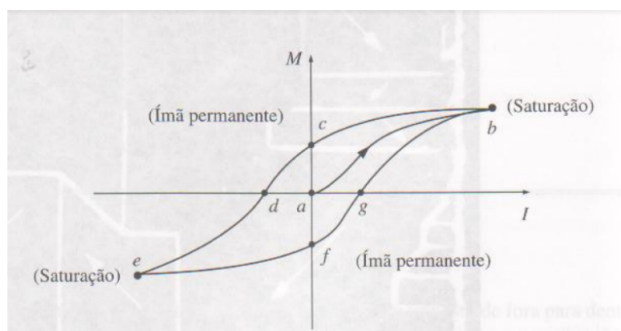
(a) Range de temperaturas completo



(b) Temperatura  $T = 1$  u.c. excluída (comportamento extremamente não linear)

**Figura 16:** Curvas de susceptibilidade magnética em função do campo magnético externo para diferentes temperaturas. Quando  $T \sim T_c$  o comportamento não linear é evidenciado. Quando  $T \gg T_c$  o comportamento linear paramagnético torna-se predominante ( $\chi_M \approx \text{const}$ ). Parâmetros de simulação:  $N = 10$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $N_{\text{var}} = 1000$ .

A propriedade da resposta não linear dos materiais ferromagnéticos à aplicação de campos magnéticos externos fundamenta a base de todas as suas aplicações práticas. A magnetização desses materiais depende não somente dos campos magnéticos aplicados, mas também do *histórico prévio de estados de magnetização*. Uma vez que os spins estejam todos alinhados em um determinado sentido, o material resistirá à reversão do ciclo e à reorientação dos spins no sentido contrário. É por esse motivo que o fenômeno em questão é chamado de *ciclo de histerese* (palavra derivada do grego antigo, que significa "atraso" ou "retardo"); e é também exatamente esse o fenômeno que está por trás da característica fundamental dos materiais ferromagnéticos supracitada na seção 1. Se, dentro de um determinado regime de temperaturas estes materiais atingirem um estado de saturação com magnetização resultante não nula, *eles serão capazes de reter essa magnetização e atuar como ímãs permanentes*, podendo portanto serem utilizados para os mais variados fins. [2]



**Figura 17:** Curva de histerese para materiais ferromagnéticos. [2]

## 5. CONCLUSÃO

Tendo em vista as discussões apresentadas no corpo do presente estudo, a principal conclusão que se pode validar é que o Modelo de Ising é, de fato, um modelo teórico riquíssimo e com vasto grau de aplicabilidade. Muita informação física foi obtida a partir de sua aplicação a sistemas magnéticos bidimensionais básicos, e ainda há muitas outras variáveis extras que poderiam ser trabalhadas e que não foram incluídas nesse trabalho.

Dentro do contexto dos materiais ferromagnéticos, que são justamente os sistemas que o Modelo de Ising inicialmente se propôs a explicar, pode-se concluir que o grau de similaridade dos sistemas simulados com relação aos sistemas reais é muito alto. Todas as características desses materiais que são observadas em laboratório, tais como a

transição de fase, a saturação magnética, a histerese, etc., foram identificadas com alto grau de confiabilidade.

Todos os resultados obtidos pelo modelo estavam perfeitamente dentro das expectativas teóricas propostas por Lars Onsager. Mesmo em alguns poucos casos nos quais foram observados dados aparentemente atípicos, o modelo ainda se provou eficiente e mostrou que pode incluir efeitos físicos que nem mesmo estavam sendo esperados inicialmente (problema da metaestabilidade explorado na seção 3).

## REFERÊNCIAS

- [1] Luis R. W. Abramo. *Notas de Aula - Eletromagnetismo 1*. URL: <https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=91263>.
- [2] David J Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. Pearson, 2013.
- [3] Nicholas Metropolis et al. "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines". Em: *Journal of Chemical Physics* 21.6 (1953), pp. 1087–1092.
- [4] Claudio Scherer. *Métodos computacionais Da Física*. Liv. da Física, 2010.
- [5] Daniel V. Schroeder. *An introduction to thermal physics*. eng. San Francisco, CA, 2000 - 2000.
- [6] C. N. Yang. "The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model". Em: *Phys. Rev.* 85 (5 mar. de 1952), pp. 808–816. DOI: 10.1103/PhysRev.85.808. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.85.808>.