

## O Modelo de Ising 2D

Lucas Modesto da Costa  
Instituto de Física, Departamento de Física Geral - USP

O modelo de Ising é uma ferramenta importante para o estudo de materiais com propriedades magnéticas definindo que cada elemento pode estar em dois estados. Apesar das aproximações consideradas no problema, o modelo apresenta resultados próximos a realidade. Usando um tratamento estatístico, obtemos as grandezas desejadas a partir das medias no decorrer da simulação de Monte Carlo usando o algoritmo de Metrópolis. Determinaremos a magnetização do sistema para diferentes tamanhos de rede e temperaturas afim de verificar o seu comportamento perto da transição de fase.

### I. INTRODUÇÃO HISTÓRICA

O modelo de Ising trata o comportamento de elementos individuais como os componentes de spins, presença de átomos ou moléculas em sítios, atividade neural, etc<sup>6</sup>. Esses elementos modificam suas propriedades de acordo com os outros elementos da vizinhança e também com o ambiente que está presente, no caso dos spins o ambiente interfere com a temperatura e campo magnético externo. Devido a essa grande variedade de aplicações podemos considerar um modelo de sucesso, usado em diferentes situações e problemas, com mais de 12.000 publicações entre 1969 e 1997.

O modelo foi proposto por Wilhelm Lenz em 1920 para o estudo de fenômenos magnéticos em materiais e foi resolvido exatamente para uma dimensão pelo estudante Ernst Ising em 1925. Ising ficou seriamente desapontado por que o caso de uma dimensão não tinha transição de fase e magnetização espontânea. O nome “Modelo de Ising” foi concebido em uma publicação<sup>5</sup> de 1936 de R. Peierls com o título “*On Ising’s Model of Ferromagnetism*” no qual demonstra que a magnetização espontânea pode existir no caso bidimensional. Lars Onsager resolveu o modelo para duas dimensões na ausência de um campo magnético em 1944 e demonstrou a transição de fase. Sem nenhuma aproximação, a solução analítica tanto para duas como para três dimensões se torna impossível. Embora seja um problema em aberto, sabe-se que é possível provar a existência da magnetização espontânea a baixas temperaturas para os casos de duas e três dimensões.

### II. DEFINIÇÕES PRELIMINARES

Devido a variedade de aplicações do Modelo de Ising, vamos tratar apenas a referente a orientação momentos magnéticos. Sabe-se que qualquer material magnético perde o estado ordenado<sup>3</sup> quando a temperatura é maior do que a temperatura crítica ( $T_c$ ) ou também conhecida Temperatura de Curie. Acima deste ponto, o fenômeno de histerese não pode mais ser observado. Quando um material é catalogado como magnético está intrínseco que os íons que o compõem possuem um momento magnético expressivo e se existe alguma interação entre esses momentos de tal forma que é forçada alguma ordenação ao sistema.

Uma definição clássica é que essa interação ocorre entre os dipolos magnéticos dos elementos com um campo externo. Porém esse campo externo sofre influência dos dipolos dos elementos vizinhos. Dessa forma, a energia

de interação entre magnética fica

$$E = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - 3(\vec{\mu}_1 \cdot \hat{r})(\vec{\mu}_2 \cdot \hat{r})].$$

Porém, substituindo as variáveis pelos valores encontrados na literatura observaremos que o resultado não chega nem perto dos valores experimentais.

A melhor explicação para esses efeitos consiste em considerar usando conceitos quânticos<sup>2</sup>, referente ao spin eletrônico. Simplificando o sistema para 2 elétrons em cada sítio (considerando que cada sítio possui 1 íon), no qual são férmions e que estão sujeitos ao princípio de exclusão de Pauli. Esses elétrons podem ser encontrados em dois estados:

- *singleto*:  $\psi_S(1, 2) = \frac{\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)}{\sqrt{2}}$
- *tripeto*:  $\psi_T(1, 2) = \frac{\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)}{\sqrt{2}}$

A diferença de energia entre esses dois estados vem da integral de troca

$$2J = E_S - E_T = 2 \int d\hat{r}_1 d\hat{r}_2 \psi_a^*(1)\psi_b^*(2)\mathcal{H}\psi_a(2)\psi_b(1).$$

Lembrando que o operador momento angular de spin é  $\hat{\mathbf{S}}$ , a energia do sistema será formada por um termo que representa uma energia média mais um termo de acoplamento:

$$E = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S - E_T)\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2.$$

Dessa forma, obtemos o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j.$$

Ao tratar muitos elétrons o problema se torna bastante complicado. O método descrito acima trata a interação aos pares e por esse motivo o termo dois foi eliminado.

A maioria dos materiais possuem esses spins distribuídos de forma desorganizada, da forma que o campo magnético do material é nulo. Mas existem alguns materiais com uma distribuição de momentos altamente alinhado, possuindo um campo magnético intenso. Temos os seguintes estados nos quais os materiais com traços magnéticos podem estar:

- **Paramagnéticos** - possuem spins desemparelhados e que quando na presença de um campo magnético os mesmos se alinham, provocando um

leve aumento na intensidade do valor do campo magnético. Esses materiais são fracamente atraídos pelos ímãs. Exemplos na temperatura ambiente: o alumínio, o magnésio, o sulfato de cobre, etc.

- **Diamagnéticos** - são materiais que na presença de um campo magnético tem seus spins orientados no sentido contrário ao campo aplicado, diminuindo a intensidade do mesmo campo. Exemplos na temperatura ambiente: o bismuto, o cobre, a prata, o chumbo, etc.
- **Ferromagnéticos** - possuem spins alinhados ou que na presença do campo magnético externo se organizam facilmente, aumentando a intensidade do campo magnético. Exemplos na temperatura ambiente: ferro, cobalto, níquel, etc.

### III. METODOLOGIA

O modelo de Ising estudado nesse trabalho consiste num plano com  $N$  spins espalhados nos sítios de uma rede quadrada. Os spins não podem sair de seus sítios e para cada um deles, associamos um valor referente a orientação clássica. A hamiltoniana do sistema é

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

com  $\sigma = \pm 1$  e a condição de primeiros vizinhos

$$J_{ij} = \begin{cases} J & \text{se } i, j \text{ forem vizinhos} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2)$$

Estamos considerando o campo magnético externo igual a zero, logo  $H = 0$ . Não há energia cinética na equação 1 e a mesma contém informação sobre a orientação do spin e da distribuição na rede.

Magnetização no modelo de Ising é dada simplesmente pela soma de cada de todos os spins.  $M$  é definido como

$$M = \sum_i \sigma_i. \quad (3)$$

Como vamos tratar diferentes números de spins ( $N$ ), é conveniente tratar a densidade de magnetização,  $m = \frac{M}{N}$ .

Teremos um problema ao calcular a energia próximo das bordas da caixa de simulação, já o modelo trás a dependência dos vizinhos. Para contornar essa situação, usamos as condições periódicas de contorno para que os elementos de uma borda, interagem com os outros elementos da borda oposta. Assim, nossa simulação corresponde a uma pequena região contida em um grande sistema de dimensão infinita. Conforme a figura 1, a condição de contorno usada repete os elementos do limites da caixa no lado oposto, como se fosse uma folha de papel que possui as bordas casadas.

Sabemos que a probabilidade que o estado específico ocorrer é dada pela função de distribuição de Boltzmann

$$P(\alpha) = \frac{1}{Z} e^{\frac{-E_\alpha}{k_B T}}. \quad (4)$$

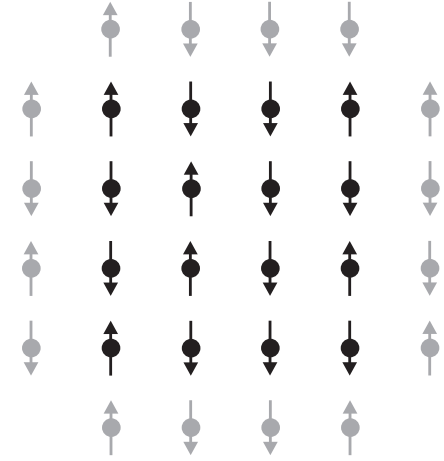


Figura 1: os elementos em cinza são apenas imagens das bordas para o cálculo da energia.

Dada a função de partição  $Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$ , podemos obter o calor específico da seguinte forma

$$c = \frac{k_B \beta^2}{N} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (5)$$

com  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ . A suscetibilidade magnética é dada na forma

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{k_B T}{N} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial H^2}. \quad (6)$$

No processo de simulação, as grandezas físicas são obtidas simplesmente calculando a média de seus valores durante os passos de Monte Carlos sob as mesmas condições como temperatura ( $T$ ) e tamanho da rede ( $N$ ). Para obter a probabilidade  $P(\alpha)$ , usa-se um processo markoviano gerando uma matriz estocástica<sup>4</sup>. A intenção é fazer a probabilidade depender apenas da diferença de energia entre dois estados, um estado inicial e um final. Desta forma, a função de partição pode ser desprezada.

Segue agora o procedimento de simulação do algoritmo de Metrópolis a partir de uma rede com todos os spins alinhados. Descreveremos como a simulação trabalha para uma determinada temperatura ( $T$ ) e número de spins ( $N = l^2$ ):

- seleciona um spin aleatoriamente:
  1. calcula  $\Delta E$  de uma possível mudança de orientação;
  2. se  $\Delta E \leq 0$ , então ocorre uma mudança de orientação. Caso contrário, fazemos  $prob = \frac{-\Delta E}{T}$ :
    - caso  $rand \leq prob$ , muda a orientação do spin;
    - caso  $rand > prob$ , não ocorre mudanças no sistema.
  3. atualiza a energia e magnetização;
  4. escolha um spin aleatório novamente e repita o processo acima.
- após selecionar  $N$  spins, incrementa o passo de Monte Carlo;

- atualiza os valores de  $E$  e  $M$ .

$rand$  é um número aleatório gerado na simulação de intervalo  $0 < rand < 1$  que faz o papel de probabilidade. O procedimento acima é repetido conforme o número de passos de Monte Carlos. Esse algoritmo acima é chamado de Metrópolis.

Podemos obter propriedades como  $c$  e  $\chi$ , usamos as flutuações dos valores da energia e magnetização respectivamente. Trabalhando com unidades reduzidas, definimos  $J = 1$  e  $k_B = 1$ . Dessa forma, temos

$$c = \frac{1}{NT^2} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (7)$$

$$\chi = \frac{1}{NT} [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2]. \quad (8)$$

Para encontrar a temperatura crítica,  $T_c$ , num sistema infinito, devemos aplicar o limite termodinâmico para alguma propriedade que demonstre um comportamento peculiar e bem definido, como os picos formados no calor específico ou na suscetibilidade magnética. Fazendo um gráfico de  $T_c(N)$  de  $c$  ou  $\chi$  em função de  $N^{-1}$ , esperamos obter uma curva tal que o coeficiente linear definirá a temperatura crítica. A temperatura crítica já é conhecida no meio científico e seu valor é

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \simeq 2,2691853 \quad (9)$$

Como nesse trabalho estamos trabalhando apenas com a magnetização, é interessante tratar a hipótese de escala para sistemas finitos. Definindo  $\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c}$ , temos a relação do valor da magnetização em função da temperatura e do número de spins do sistema

$$M = N^{-\frac{\beta}{2\nu}} \widehat{M}(\varepsilon N^{-\frac{\beta}{2\nu}}), \quad (10)$$

onde  $\nu, \beta$  são expoentes críticos e para o caso de duas dimensões tem os valores  $\nu = 1$  e  $\beta = 0.125$ .  $\widehat{M}$  é uma função tal que é uma constante quando  $\varepsilon = 0$ .

#### IV. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ressaltamos que todas as grandezas estão em unidades reduzidas e que a magnetização está dividida pelo número de spins, ou seja, estamos tratando a densidade de magnetização ( $m$ ). O número de passos de Monte Carlo é igual a  $10^6$  onde foram desprezados 10%. Como primeiro resultado, mostramos o histograma da magnetização para diferentes temperaturas e tamanhos de rede nas figuras 2, 3 e 4. Essa função de distribuição demonstra claramente que o valor médio da magnetização converge para o valor esperado.

Estamos trabalhando apenas o módulo da magnetização por dois motivos:

- padronização de resultados, já que não há uma definição de orientação inicial e valor dessa orientação;

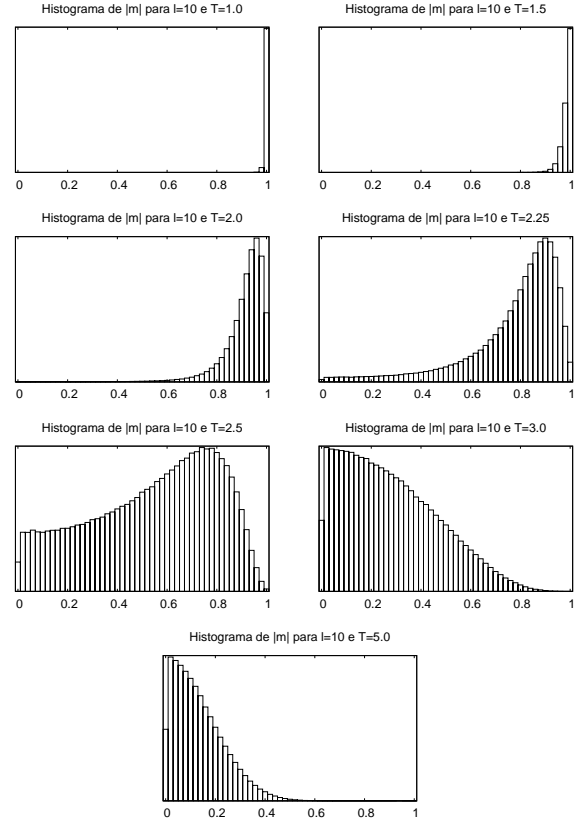


Figura 2: histogramas para diferentes temperaturas na rede de spins com  $N = 100$ .

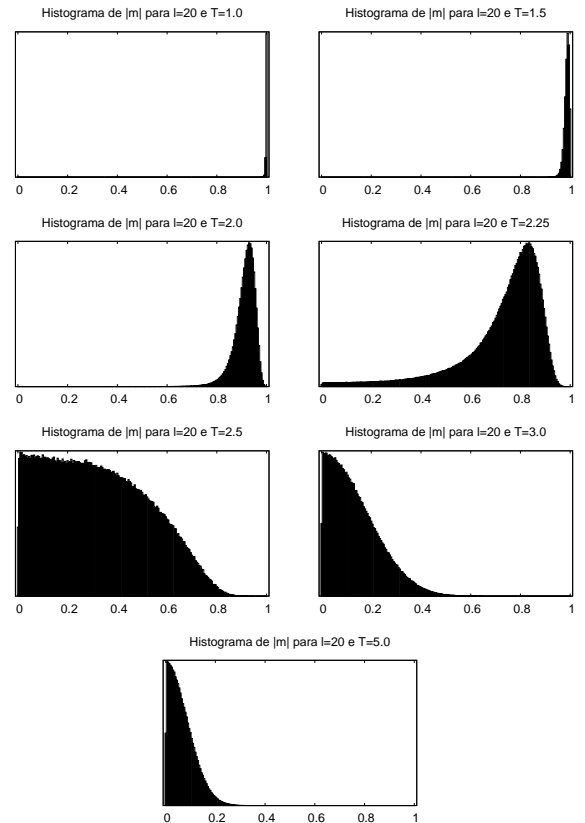


Figura 3: histogramas para diferentes temperaturas na rede de spins com  $N = 400$ .

- no decorrer de um passo de Monte Carlo, todos os

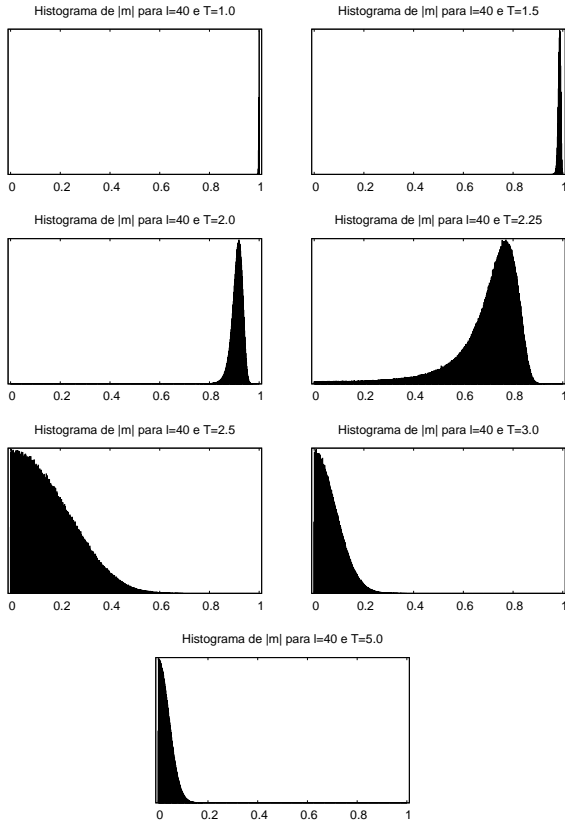


Figura 4: histogramas para diferentes temperaturas na rede de spins com  $N = 1600$ .

elementos podem mudar de orientação como uma transição espontânea. Apesar do fenômeno não mudar a magnitude da magnetização, poderá ocorrer falhas durante o cálculo da média.

Ao trabalhar dessa forma, temos um problema ao tratar uma rede com número de spins par. Observando as figuras 2, 3 e 4, o valor do histograma quando  $m = 0$  sofre uma queda comparado ao valor da vizinhança. Isso se deve porque temos a magnetização discretizada em  $2N+1$  valores, e os valores diferentes de  $m = 0$  serão somados aos pares  $m$  e  $-m$ . O valor do histograma quando  $m = 0$  não terá nenhum acréscimo e passará a imagem de ter metade da probabilidade dos outros valores.

Com relação a curva de distribuição da magnetização, podemos verificar que quanto maior a rede, mais estreita será essa curva. Com o aumento da caixa, o sistema terá mais estados possíveis de ocupar, quebrando uma mesma barra do histograma de um sistema pequeno em diversas outras com probabilidades diferentes entre si. Assim, os estados mais prováveis serão contabilizados muito mais que os outros. Essa diferença de probabilidades dos novos valores de  $m$  que geram esse afinamento no histograma.

Observa-se também que quanto maior a rede, mais flutuações aparecem na curva gerada pelo histograma. Essas pequenas flutuações, ou ruídos, são criadas quando o número de passos de Monte Carlo é pequeno comparado ao tamanho da rede. Isso significa que para cada rede que contenha  $n$  spins tem que ter um número de passos de MC proporcional ao mesmo  $n$ .

Em temperaturas baixas, dificilmente os spins trocam de orientação pois a probabilidade é desfavorável. Com

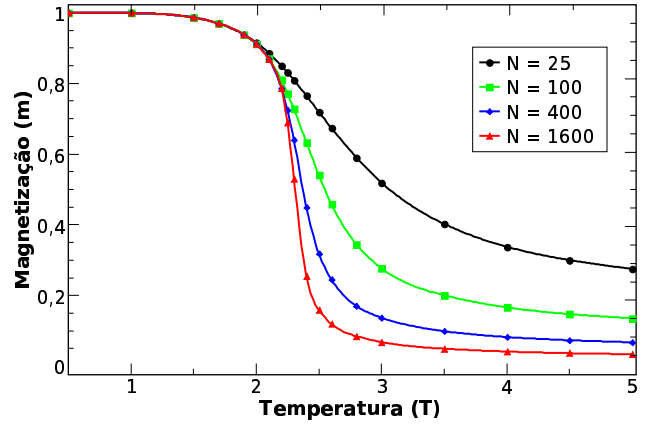


Figura 5: magnetização média em função da temperatura para diferentes tamanhos de rede.

o aumento da temperatura, alguns spins mudam de sentido e ao passar pela  $T_c$ , o sistema tenderá anular a magnetização total. Observando que a curva da figura 5 é mais suave para sistemas pequenos e apresenta grande flutuação. Para sistemas grandes, a curva é mais fechada. A curva terá uma assíntota no limite  $N \rightarrow \infty$  ao chegar a temperatura crítica. Esse resultado mostra a transição de fase para a amostra que inicialmente estava no estado ferromagnético e ao passar pelo ponto crítico se torna paramagnético.

O comportamento da magnetização é praticamente o mesmo para diferentes número de spins: estável até chegar na temperatura crítica e depois decresce forma de forma mais aguda dependendo do tamanho do sistema. Após essa temperatura, a magnetização deve aproximar mais ainda do zero quanto maior for o sistema. Com relação a a barra de erros, são tão pequenas que nesses gráficos quase é impossível de enxergar-las. Observa-se na tabela I que os valores da barra de erro são bem pequenos. Os maiores valores são encontrados próximo da temperatura crítica de cada tamanho de rede. Claramente, um número menor de passos de MC contribuem para o aumento da barra de erro.

$N$	$T = 1.0$	$T = 3.0$	$T = 2.25$	$T^* = 2.25$
25	$1.1725 \cdot 10^{-5}$	$7.3431 \cdot 10^{-4}$	$4.7887 \cdot 10^{-4}$	$2.0058 \cdot 10^{-3}$
100	$6.8286 \cdot 10^{-6}$	$4.6612 \cdot 10^{-4}$	$1.1017 \cdot 10^{-3}$	$3.8690 \cdot 10^{-3}$
400	$3.6005 \cdot 10^{-6}$	$4.4921 \cdot 10^{-4}$	$1.8162 \cdot 10^{-3}$	$5.4985 \cdot 10^{-3}$
1600	$8.3631 \cdot 10^{-7}$	$1.1950 \cdot 10^{-4}$	$3.6467 \cdot 10^{-3}$	$5.3255 \cdot 10^{-3}$

Tabela I: valores da barra de erro para diferentes situações.  $T^* = 2.25$  é uma simulação realizada com um décimo do número de passos de MC.

Aplicando o logaritmo na equação 10 e trabalhando na temperatura de  $T = 2.27$ , que é bem próxima da crítica, obtemos uma função linear. A partir dos resultados da figura IV envolvendo o coeficiente angular da curva  $T_c$ , obtemos que  $\beta = 0.12424 \pm 0.00302$ . Esse valor do expoente crítico é bem próximo do esperado, demonstrando que o processo é muito coerente.

Podemos obter a energia em função da temperatura e veremos que o seu comportamento é parecido com da magnetização. Ao calcular o calor específico e a suscetibilidade magnética, veremos um ponto no qual es-

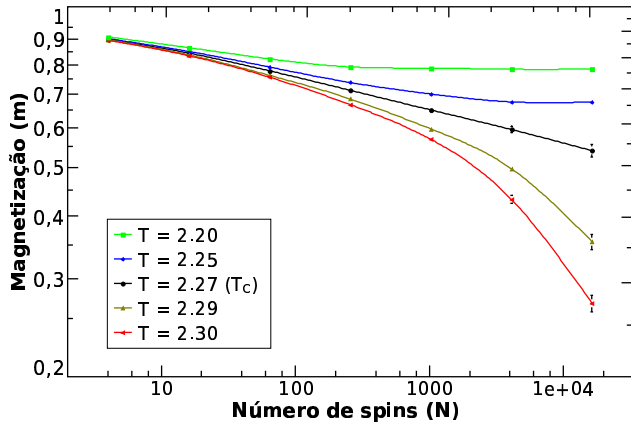


Figura 6:  $\ln$  da magnetização média em função do  $\ln$  do número de sítios da rede para diferentes temperaturas.

As curvas não serão contínuas. Esse ponto é diferente

para cada tamanho de rede e demonstra a temperatura crítica do sistema de  $N$  spins. Obtendo essas temperaturas em função de  $N$ , poderemos aplicar o limite termodinâmico e assim obter a temperatura de Curie. Outro estudo que pode ser efetuado é a correlação do sistema em função do tamanho da rede e da temperatura.

Seria interessante adicionar o campo magnético externo para ver o comportamento e comparar com o caso do campo nulo. Poderíamos também fazer esse mesmo tratamento usando o algoritmo de Wang-Landau, no qual tenta obter de forma precisa a densidade de estados  $g(E)$  produzindo um histograma no espaço de energia. Usando este método, nos não iremos apenas evitar a repetição em múltiplas temperaturas, mas seremos capazes de estimar a energia livre e a entropia, quantidades que não são obtidas diretamente usando simulação de Monte Carlo, além de obter propriedades já conhecida como energia, magnetização, calor específico e suscetibilidade magnética em função da temperatura.

<sup>1</sup> K. Binder and D. W. Heermann: **Monte Carlo Methods in Statistical Physics**, Springer-Verlag (1992).

<sup>2</sup> N. W. Ashcroft and N. D. Mermin: **Sólid State Physics**, Holt, Rinehart and Winston (1976).

<sup>3</sup> M. J. de Oliveira: **Termodinâmica**, Ed. Livraria da Física (2005).

<sup>4</sup> T. Tomé and M. J. de Oliveira: **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade**, Ed. USP (2001).

<sup>5</sup> R. Peierls, Proc. Cambridge Phil. Soc. 32 (1936) 477.

<sup>6</sup> S. Salinas: **Introdução à Física Estatística**, Ed. USP (1999).