

Modelo de Ising

Lucas Monteiro (fc52849@alunos.fc.ul.pt)

Estudo de configurações do Modelo de Ising ferromagnético de rede quadrada de diferentes tamanhos utilizando simulações de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis, com o objetivo da estimação da temperatura crítica do sistema.

Introdução

O Modelo de Ising, nomeado em homenagem ao físico alemão Ernst Ising, é um modelo matemático inicialmente desenvolvido para entender melhor o ferromagnetismo. Neste trabalho vai-se estudar o modelo de Ising ferromagnético numa rede quadrada com $N=L*L$ sítios e condições de fronteira periódicas, tanto horizontal como verticalmente.

Este modelo consiste em variáveis discretas que representam os *spins* atômicos σ , que podem assumir um de dois estados, ou valores -1 e 1 . A magnetização M do sistema é dado pela equação (1).

$$M = \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

Os diferentes *spins* vão interagir aos pares com os seus vizinhos próximos, sendo estes os diretamente à esquerda, direita, cima e baixo. Assim, a energia total E da configuração é dada pelo Hamiltoniano \mathcal{H} que se calcula pela fórmula (2) quando todos os pares têm a mesma força de interação J , e o campo magnético exterior H é igual ao longo da rede. Durante o trabalho apenas se vai estudar o cenário onde não há campo magnético exterior ($H = 0$) e J , em unidades reduzidas, igual a 1.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_j \sigma_j \xrightarrow{H=0} E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2)$$

Nota-se que quando $J = 0$ os *spins* não interagem. Quando $J > 0$, *spins* vizinhos iguais têm uma energia menor do que *spins* vizinhos diferentes e, como o sistema tende para a energia mais baixa, espera-se que a configuração tenda para que todos os *spins* tenham o mesmo valor, ou estejam *orientados*, logo com maior magnetização. Diz-se assim que interação é *ferromagnética* quando $J > 0$ e quando $J < 0$ diz-se *anti-ferromagnética* pois o sistema vai tender para que os *spins* vizinhos sejam tanto mais diferentes uns dos outros.

O sistema vai sempre tender para a configuração de menor energia, no entanto a temperatura do sistema vai perturbar essa tendência até que o sistema não vai ser magnético de todo. À temperatura onde se dá esta transição de fase chama-se **temperatura crítica** ou T_c .

Pretende-se então calcular T_c . Para o caso onde $H = 0$ numa rede quadrada, T_c foi calculada analiticamente por Lars Onsager em 1944 como:

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.26918531421$$

1. Simulações de Monte Carlo: modelo de Ising

Começa-se então por criar uma rede quadrada com L de lado e *spins* todos orientados para cima (ou $\sigma_i = 1, \forall i$). Não há problema em começar com esta configuração pois o sistema é ergódico, ou seja, todas configurações X_j são acessíveis a partir de X_i . Com esta configuração calcular-se facilmente a magnetização inicial do sistema.

$$M = \sum_{i=0}^N \sigma_i = \sum_{i=0}^N 1 = N$$

O cálculo da energia do sistema inicial não é tão óbvio pois tem de se ter o cuidado de não ter em consideração a energia de um par de vizinhos duas vezes, no entanto, como o sistema tem condições de fronteira periódicas e todos os *spins* têm o mesmo valor, podemos considerar a interação de apenas dois dos quatro vizinhos da configuração inicial, evitando assim o problema supracitado.

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \stackrel{J=1}{=} -2 \sum_{i=0}^N 1 = -2N$$

Para simular a evolução do sistema vão ser utilizados o método de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis, que é o algoritmo de Monte Carlo mais utilizado para calcular estimações num modelo de Ising, implementados da seguinte forma.

A cada iteração, ou *Monte Carlo step*, escolhe-se um sítio da rede aleatoriamente e calcula-se a variação de energia ΔE associada à inversão do *spin* desse sítio. Para escolher um sítio da rede i gerou-se aleatoriamente um número $i \in [0; N[$ utilizando o gerador de números aleatórios *Mersenne Twister* e *rng_coin* da biblioteca *random*.

Como os *spins* interagem apenas com os vizinhos próximos (nn), calcula-se ΔE localmente. Como se escolheu estrategicamente os valores de *spin* como 1 e -1 temos que $\sigma_i^f = -\sigma_i^i$. Temos então que:

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_f - E_i = \\ &= -\sigma_i^f \sum_{j \in nn} \sigma_j - (-\sigma_i^i \sum_{j \in nn} \sigma_j) \stackrel{\sigma_i^f = -\sigma_i^i}{=} 2\sigma_i^i \sum_{j \in nn} \sigma_j \end{aligned}$$

Sabendo o ΔE , se este for menor que 0 o sistema vai tender para esse estado logo altera-se o *spin* original, multiplicando-o por -1. Se for maior ou igual a zero o *spin* é invertido com probabilidade $p = \exp(-\frac{\Delta E}{k_B T})$.

Isto é feito gerando um novo número aleatório de 0 a 1. Se este for menor que p então o *spin* é invertido, caso contrário não. No trabalho k_B foi tomado como 1.

Caso haja inversão, a energia e a magnetização do sistema são recalculadas somando-lhes ΔE ou ΔM , respectivamente. Como M é dado por (1), ΔM é 2 vezes o *spin* depois da inversão, pois se este se altera de -1 para 1 temos uma diferença de +2, de 1 para -1, -2, assim:

$$\Delta M = 2\sigma_i^f$$

Deixou-se então uma configuração de lado $L = 50$ evoluir até estabilizar para diferentes temperaturas. Foram suficientes 100 *Monte Carlo Sweeps*, que são N *Monte Carlo steps*, em todos os sistemas para estes estabilizarem. Observa-se na Figura 1 que para temperaturas menores que T_c teórico os *spins* estão praticamente todos alinhados; para maiores não, como se esperava.

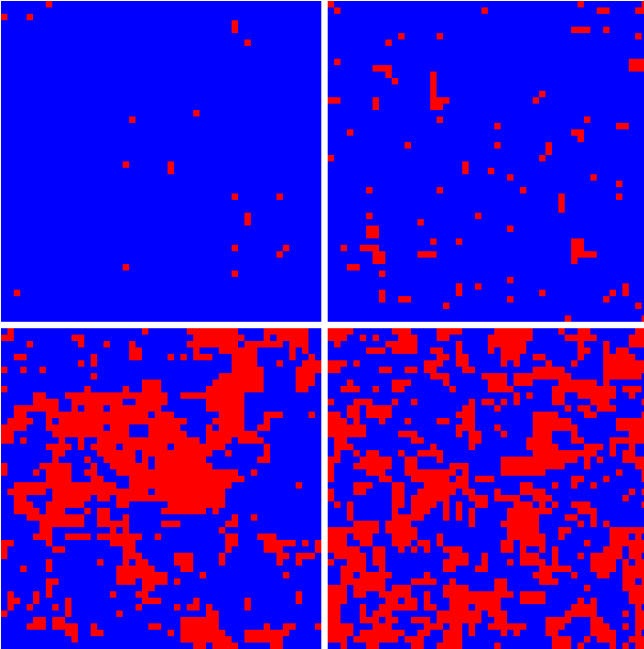


Figura 1. Configurações com $L = 50$ estabilizadas para $T = 1.5$ e 2.0 (em cima) e 2.5 e 3.0 (em baixo), respectivamente.

2. Estatística

Para se estimar então a temperatura crítica do sistema fez-se o gráfico do valor médio da energia total, $\langle E \rangle$, e da magnetização, $\langle M \rangle$, em função da temperatura para configurações com $L = 50$, 100 e 200 .

Para isso deixou-se os sistemas estabilizarem em 100 temperaturas diferentes uniformemente distribuídas entre $T = 0$ e 4 onde, para reduzir a correlação entre amostras, a média foi feita sobre amostras obtidas a cada três *Monte Carlo Sweeps*. Também, ao varrer as temperaturas de 0 para 4 , foi utilizada sempre a configuração final da temperatura anterior como ponto de partida para a nova temperatura.

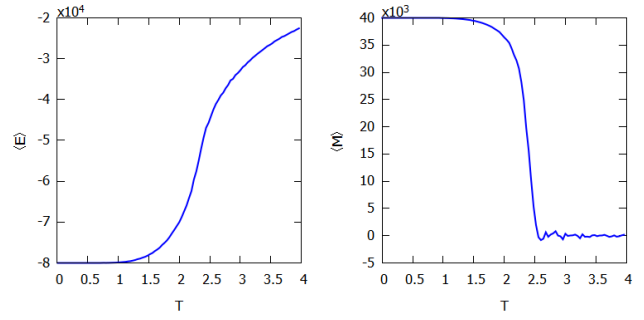


Figura 2. Gráficos dos valores médios da energia total (á esquerda) e da magnetização (á direita) em função da temperatura com $L = 200$.

Como era esperado, à medida que T aumenta, a M do sistema decresce lentamente até que se dá a transição de fase, antes de $T = 2.5$ e próximo de T_c teórico, e M estabiliza em 0 . A energia aumenta com o aumento da temperatura e, também antes $T = 2.5$, há um ponto de inflexão no seu crescimento. Verificou-se também que o aumento do tamanho do sistema apenas salienta os declives observados, especialmente no gráfico de $\langle M \rangle$.

Para melhor localizar a temperatura crítica diminui-se o intervalo das temperaturas para $T \in [2, 3]$ e, depois, $T \in [2.3, 2.5]$ sempre dividindo-os em 100 temperaturas diferentes. Analisando os gráficos da magnetização média em função da T , que estão representados na Figura 3, pode-se estimar a T_c do sistema em ≈ 2.35 , que é onde o sistema aparenta alcançar, e estabilizar em, $M = 0$.

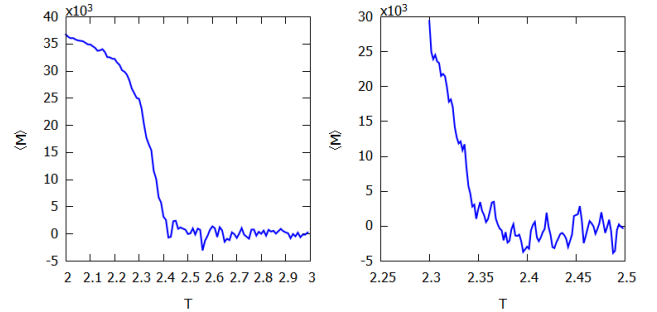


Figura 3. Gráfico de $\langle M \rangle$ em função de T a variar entre 2.0 e 3.0 (á esquerda) e 2.3 e 2.5 (á direita) com $L = 200$.

Conclusão

Conclui-se que o Modelo de Ising ferromagnético utilizando o método de Monte Carlo e algoritmo de Metropolis é um modelo muito simples que demonstra uma transição de fase e capaz de fazer uma boa estimativa da temperatura crítica do sistema. Com este método estimou-se $T_c \approx 2.35$, com um erro relativo de $\approx 3.56\%$.

Referências

- 1 - en.wikipedia.org/wiki/Ising_model