

**EXATAS E DA TERRA**

# PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL VIA MONTE CARLO

**FRANCELINO, Isabella Grinberg.**

Estudante do Curso de Engenharia Física- ILACVN – UNILA;

E-mail: [isabella.francelino@aluno.unila.edu.br](mailto:isabella.francelino@aluno.unila.edu.br);

**Lapa, Rodrigo Santos**

Docente/pesquisador do curso Engenharia Física – ILACVN – UNILA.

E-mail: [rodrigo.lapa@unila.edu.br](mailto:rodrigo.lapa@unila.edu.br).

## 1 Introdução

Nosso objetivo neste projeto é estudar numericamente as propriedades do modelo de Ising em duas dimensões numa rede quadrada. O modelo em questão foi proposto em 1920 por Wilhem Lenz a Ernst Ising que em 1925 [1] apresentou resultados importantes para estudo das propriedades termodinâmicas de modelos de spin. Diferente do modelo estudado por Ising naquela ocasião, que foi uma cadeia linear de spins em que não foi observado nenhum tipo de transição de fase para qualquer temperatura não nula, nosso modelo é bidimensional numa rede quadrada. Pretendemos observar o comportamento das principais quantidades observáveis como magnetização, energia, calor específico e susceptibilidade magnética em função da temperatura. Como se sabe, os materiais ferromagnetos apresentam uma transição de fase do tipo ordem-desordem em uma temperatura  $T_c$  conhecida como temperatura de Curie-Weiss, onde nas proximidades desta temperatura, as quantidades mencionadas acima têm um comportamento interessante. Como o estudo analítico de problemas desta classe (sistemas de muitos corpos interagentes) é em alguns casos impossível ou até mesmo inviável para um aluno de graduação, utilizamos um método simulacional relativamente simples, que é o método de Monte Carlo, e que pode fornecer ótimos resultados neste tipo de problema.

Com o desenvolvimento de computadores cada vez mais potentes, atualmente a simulação computacional de sistemas físicos ganhou notável força. As vantagens de avaliar um problema através de uma simulação, são as possibilidades de se obter resultados preliminares que podem ajudar no tratamento de dados experimentais e fornecer pistas para a interpretação de fenômenos desconhecidos, sem a necessidade da complicação de uma medição em laboratório, onde são necessários protocolos complicados, e em alguns casos, demorados.

## **2 Metodologia**

Neste projeto utilizamos o método de Monte Carlo [2,3] para estudar as propriedades termodinâmicas do modelo de interesse, e é o mais importante e um dos mais utilizados em simulações para esta finalidade. Porém podemos ainda encontrar muitas aplicações deste método em Química, Matemática e Biologia. É um método numérico que permite resolver um problema utilizando uma sequência de passos, como uma receita.

Em física estatística [4], que é o ramo da física em que se enquadra o nosso trabalho, o objetivo central é o cálculo da função de partição do problema, que nos dá informações sobre as diferentes configurações do sistema físico. Em alguns casos esta função é impossível de se calcular analiticamente, por isso técnicas numéricas são desenvolvidas com o objetivo de serem utilizadas nestas situações [5].

No método de Monte Carlo as grandezas termodinâmicas são calculadas através de integrais de grandezas específicas no espaço de fase (descrição completa do estado de um sistema de partículas especificando a posição e o momento de cada partícula). É neste ponto que o método mostra sua vantagem, pois utiliza a amostragem seletiva que consiste em amostrar o espaço de fase de configurações de acordo com a distribuição de Boltzmann, de forma que as médias estatísticas são obtidas fazendo uma média aritmética sobre as configurações selecionadas.

## **3 Fundamentação teórica**

O magnetismo foi um fenômeno observado há muito tempo (Grécia antiga), porém as primeiras teorias e experimentos na tentativa de explicar tal fenômeno só ganharam força no final do século XIX e começo do século XX com o desenvolvimento da mecânica quântica. Importantes contribuições foram realizadas neste campo, principalmente a primeira teoria moderna do magnetismo com o conceito de campo molecular de Weiss e a famosa lei de Curie-Weiss. A teoria de Weiss [6] utiliza o conceito de campo molecular para explicar o surgimento de uma magnetização espontânea, que é o parâmetro de ordem que caracteriza a fase ordenada ferromagnética. Ainda assim, esta teoria não foi capaz de descrever o comportamento para alguns materiais. Além disso, o teorema de Von Leeuwen [7] demonstrou que o magnetismo não poderia ser explicado pela física clássica, é um fenômeno puramente quântico.

Com o surgimento da mecânica quântica, o desenvolvimento da mecânica estatística e a introdução do conceito de spin, o estudo de sistemas microscópicos de muitas partículas ganhou um impulso e com isso foi possível construir uma teoria microscópica e moderna do magnetismo. Atualmente sabe-se que as propriedades magnéticas estão associadas aos momentos magnéticos (spins) localizados nos íons e tem origem i) devido aos spins localizados (isolantes) ou ii) devido aos spins dos elétrons em movimento na rede (metal). Para alguns materiais isolantes o magnetismo do ponto de vista microscópico pode ser explicado através do modelo de Heisenberg descrito pelo hamiltoniano.

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

A interação eletrostática dos elétrons de camadas mais externas de íons adjacentes, produz uma separação dos níveis de energia eletrônicos. Por exemplo, para dois elétrons, o princípio de exclusão de Pauli exige que a autofunção de onda total seja anti-simétrica. A energia  $J_{ij}$  é chamada de interação de troca (Exchange), é a diferença entre os níveis de energia dos elétrons no estado tripleto (spins paralelos) e singleto (spins anti-paralelos). Quando o estado de menor energia entre os elétrons é o tripleto, então eles se alinham paralelamente. Quando isto acontece num material com muitos spins, isto dá origem à magnetização espontânea do material ferromagnético.

O modelo de Ising [10,11] é mais simplificado e vamos estudá-lo no caso bidimensional numa rede quadrada. O hamiltoniano é dado abaixo.

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j$$

Onde  $S_i$  e  $S_j$  representam os spins  $i$  e  $j$  adjacentes que interagem com energia  $J_{ij} > 0$ , e a  $S_i$  e  $S_j$  é atribuído um valor  $+1$  ou  $-1$  (um spin orientado para cima ou para baixo respectivamente), portanto cada sítio tem duas possibilidades. Uma configuração da rede é um conjunto particular de valores de todos os spins. Se existem  $N$  sítios, então haverão ao todo  $2^N$  diferentes configurações.

O problema matemático associado com nosso modelo é encontrar uma forma analítica fechada para a função de partição  $Z$ .

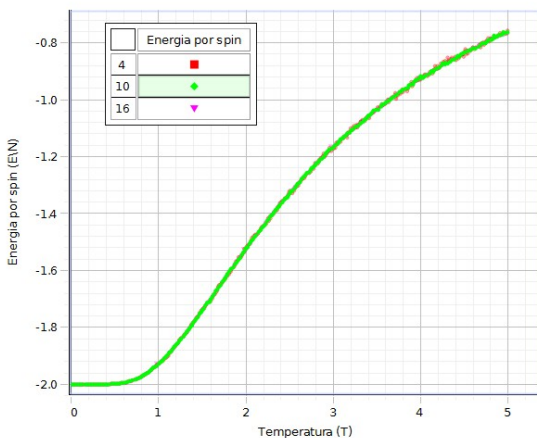
$$Z = \sum_{conf} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)$$

Onde  $E$  é a energia de interação dos  $N$  spins. A soma é feita sobre todas as configurações. Desta função conseguimos derivar todas as quantidades termodinâmicas do sistema e ainda avaliar se há transição de fase para o mesmo.

## 4 Resultados

Os gráficos obtidos a partir da simulação computacional são apresentados a seguir:

**Energia por spin em função da temperatura**



**Magnetização em função da temperatura**

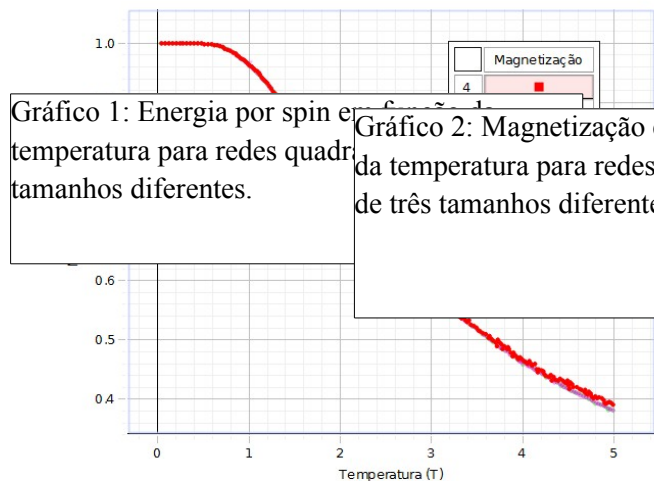


Gráfico 1: Energia por spin em função da temperatura para redes quadradas de tamanhos diferentes.

Gráfico 2: Magnetização em função da temperatura para redes quadradas de três tamanhos diferentes.

No gráfico 1, é possível verificar que a energia por spin para temperaturas elevadas é relativamente alta indicando que o sistema não está em uma configuração de mínima energia. Quando a temperatura é diminuída, a energia também diminui, indicando que os spins em cada sítio alinham-se em torno de um eixo (eixo de magnetização) e, portanto a energia tende a se estabilizar, tendo valor mínimo de  $E/NJ = -2$ , em temperaturas baixas.

No gráfico 2, para temperaturas elevadas a magnetização é pequena, indicando que o sistema tem uma configuração, onde na média, metade dos spins apontam para cima e metade para baixo. Como a magnetização é a soma dos spins em cada sítio, então ela assume valores quase nulos. Quando a temperatura é diminuída, a magnetização tende a assumir valores maiores, indicando então que nesta situação, o sistema tem uma configuração, onde na média, a maioria dos spins está alinhada em um sentido, reafirmando que para temperaturas cada vez menores, os spins tendem a alinhar-se de maneira a minimizar a energia desta configuração. Quanto  $T \rightarrow 0$  a magnetização por sítio tende então a assumir seu valor máximo, indicando agora que todos os spins alinham-se no mesmo sentido.

## **5 Conclusões**

A partir dos resultados obtidos verificamos que o comportamento de alguns dos gráficos se aproxima do que era esperado de acordo com resultados já existentes em bibliografias desta linha de pesquisa. A simulação computacional nos possibilitou estudo de propriedades do modelo de Ising para uma rede quadrada em duas dimensões e de diferentes tamanhos, em que há uma temperatura crítica, abaixo da qual os spins tendem a se ordenar. Foi observado o comportamento das propriedades estudadas próximo desta temperatura.

Para uma maior precisão dos nossos resultados, devemos ainda realizar novas simulações modificando a quantidade de passos de Monte Carlo para verificar a se há mudança significativa destes resultados preliminares. Pretendemos ainda fazer o cálculo da susceptibilidade magnética e calor específico para completar o nosso plano de trabalho.

## **6 Principais referências bibliográficas**

[1] E. Ising - Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus; Z. Phys. 31 (1) pp. 253-258 (1925)

[2] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, J. Chem. Physics 21, 1087 (1953).

[3] W. K. Hastings, Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications, *Biometrika* 57 (1), 97 (1970).

[4] Salinas, Sílvio A. R. - Introdução à Física Estatística, 2ª ed – São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo –Edusp (2005).

[5] José Pedro Rino & Bismarck Vaz da Costa – ABC da simulação computacional 1ª Ed. – São Paulo: Editora Livraria da Física (2013).

[6] P. Weiss, L'Hypothèse du champ moléculaire et de la propriété ferromagnétique, *J. de Phys.* 6, (1907) pp. 661-690.

[7] van Leeuwen, Hendrika Johanna (1921). "[Problèmes de la théorie électronique du magnétisme](#)". *Journal de Physique et le Radium*. 2 (12): 361–377.

[8] W. K. Heisenberg, *Z. Phys.* 49, 619 (1928)

[9] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* – Clarendon Press, Oxford (1958).

[10] Stephen G. Brush, "History of Lenz-Ising Model", *Rev. Mod. Physics* 39, 883 (1967).

[11] V. L. Líbero, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 22, 346 (2000).