



Universidade Estadual de Maringá
Centro de Ciências Exatas
Departamento de Física

Trabalho de Conclusão de Curso

**Resolvendo o modelo de Ising em duas
dimensões utilizando o método de Monte
Carlo**

Acadêmico: Eric Koudhi Omori

Orientador: Prof. Dr. Breno Ferraz de Oliveira

Maringá, 22 de fevereiro de 2016



Universidade Estadual de Maringá
Centro de Ciências Exatas
Departamento de Física

Trabalho de Conclusão de Curso

Resolvendo o modelo de Ising em duas dimensões utilizando o método de Monte Carlo

Trabalho de Conclusão de Curso de Física
da Universidade Estadual de Maringá, sob
orientação do professor Dr. Breno Ferraz
de Oliveira, como parte dos requisitos
para obtenção do título de bacharelado em
Física

Acadêmico: Eric Koudhi Omori

Orientador: Prof. Dr. Breno Ferraz de Oliveira

Maringá, 22 de fevereiro de 2016

Sumário

Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Introdução	1
1 Ensemble Canônico	3
1.1 Revisão de Termodinâmica [1]	3
1.2 Conceitos de Magnetização [2]	4
1.3 O valor médio da energia $\langle E \rangle$ [3]	4
1.4 Magnetização e suscetibilidade magnética	6
2 Modelo de Ising	8
2.1 O modelo	8
2.2 Solução em uma dimensão	8
2.3 Dimensionamento em escala finita	12
3 Solução Numérica	14
4 Resultados	17
4.1 Valores de Energia e Capacidade Térmica	17
4.2 Valores de Magnetização	18
4.3 Expoentes críticos e temperatura de Curie	21
Conclusões	24
A O Algoritmo	25
Referências Bibliográficas	27

Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente aos meus pais, Gilberto e Marilene, por me criarem e apoiarem até o presente momento. Aos meus irmãos, Marcelo e Marcel, que sempre estiveram ao meu lado. Aos meus amigos que fiz durante o curso, em principal o Augusto, o Allan, o Bergerson, o Getúlio, o Giuliano e o Juliano, por estarem presentes durante os momentos de festa e de estudo. Ao grupo PET que tanto me ensinou e teve um papel essencial para me manter ligado ao curso, assim como o tutor professor doutor Marcos Cesar Danhoni Neves e os integrantes que estiveram dentro do projeto durante a minha participação no mesmo. E por fim, mas certamente não menos importante, ao meu orientador professor doutor Breno Ferraz de Oliveira por toda a paciência e dedicação que tornaram possíveis a realização do presente trabalho.

Resumo

Neste trabalho foi utilizado o algoritmo de Metrópolis, que tem como base o método de Monte Carlo, para reproduzir as soluções do modelo de Ising em duas dimensões. Foi estudado o comportamento da sua magnetização e suscetibilidade magnética para se analisar a transição de um material paramagnético para um material ferromagnético. Também foram calculados os valores de energia e da capacidade térmica para se estudar a temperatura de transição do sistema. Diferentes tamanhos de rede foram utilizados a fim de verificar as possíveis alterações no comportamento da capacidade térmica e suscetibilidade magnética e, com estes dados, obter uma melhor precisão do valor da temperatura de Curie em uma rede macroscópica.

Palavras chave: Mecânica Estatística, Modelo de Ising, Método de Monte Carlo.

Introdução

A Mecânica Estatística tem por objetivo criar uma ponte de interação entre sistemas microscópicos e macroscópicos a partir de cálculos probabilísticos, e para tal, uma de suas grandes ferramentas, na interação entre teorias atômicas e sistemas termodinâmicos, são os estudos dos ensembles¹. Os 3 principais ensembles são: o ensemble microcanônico que estuda sistemas completamente isolados, isto é, sem troca de calor e partículas com o ambiente. O ensemble canônico que tem por objetivo estudar sistemas onde existe a troca de calor, mas tem um número fixo de partículas. E o ensemble grancanônico, que além da troca de temperatura com o ambiente, também o faz com seu número de partículas.

O estudo do ensemble canônico pode ser utilizado ao se estudar o modelo de Ising, nomeado a partir de Ernst Ising, que em 1924 apresentou a solução exata em uma dimensão [4]. Esse modelo, tem como objetivo principal descrever as características de uma rede de dipolos magnéticos a partir da interação entre primeiros vizinhos e interações com o campo magnético. Dentro do estudo deste modelo são observados os valores médios de energia, magnetização, suscetibilidade magnética e capacidade térmica e, com estes dados, pode-se ser percebido uma transição de fase de um material paramagnético e um material ferromagnético próximos a temperatura de Curie. Vale lembrar que tal transição ocorre pois em temperaturas acima a temperatura de Curie a agitação das moléculas torna difícil o alinhamento dos momentos de dipolo, por outro lado, ao se abaixar a temperatura temos que a os momentos de dipolo tendem se alinhar mais facilmente.

O modelo de Ising unidimensional pode ser resolvido sem grandes complicações porém, em tal modelo, não é possível se estudar a transição de fase dado que a magnetização obtida a partir deste modelo só apresenta magnetização em contato com um campo magnético. O modelo de Ising em duas dimensões apresenta resultados mais satisfatórios no que se diz respeito as características magnéticas do material. Porém, obter a solução algébrica para este modelo bidimensional pode se tornar uma tarefa penosa e, assim sendo, torna-se uma boa alternativa ir atrás de uma solução numérica.

Um método muito utilizado para se solucionar problemas relacionados a probabilidades é conhecido por método de Monte Carlo, publicado em 1945 por S. Ulam e John Von Neumann [5]. O método de Monte Carlo tem aplicações, além dos estudos em Física, em áreas da saúde [6–8], em áreas econômicas [9], entre outras. Tal modelo nega a necessidade de se resolver algumas equações diferenciais, desde que o dado sistema físico (ou matemático) possa ser definido a partir de funções de distribuição de probabilidades. Para que este modelo possa obter resultados satisfatórios, é essencial que se obtenha números aleatórios, geralmente são utilizados números entre 0 e 1. Por depender das probabilidades definidas pelo sistema estudado, um fator que é importante se observar é o número de resultados obtidos para se realizar uma análise dos mesmos.

¹Do francês conjunto, é o estudo de conjuntos de microestados, em um determinado número de energias acessíveis, onde suas propriedades podem ser estudadas a partir da probabilidades do sistema se encontrar em cada microestado.

Para se entender melhor o funcionamento do método de Monte Carlo pode-se utilizar um exemplo a partir de dois dados de seis faces. Neste exemplo se tem que a soma dos valores obtidos nas faces voltadas para cima dos dados podem ser: 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 e 12. Teoricamente, a probabilidade de se obter cada resultado é: $1/36$, $2/36$, $3/36$, $4/36$, $5/36$, $6/36$, $5/36$, $4/36$, $3/36$, $2/36$ e $1/36$ respectivamente. Para se resolver este problema a partir do método de Monte Carlo, deve-se sortear dois números aleatórios, como os números sorteados tem valores entre 0 e 1, para se ajustar ao sistema aqui trabalhado deve-se multiplicar o valor obtido em cada número por 6 e arredondar (para cima) o resultado obtido, soma-se os valores obtidos para cada dado e então é armazenado este resultado. Se repetirmos tal teste 36 vezes é pouco provável que os resultados obtidos condigam com a probabilidade teórica mencionada acima, mas, se repetirmos este teste 36×500 vezes então um resultado mais satisfatório se apresentará, e assim, quanto maior o número de testes realizados melhor será o resultado obtido.

Dentro do método de Monte Carlo um algoritmo muito utilizado é o algoritmo de metrópolis. Neste são definidos passos simulando uma evolução temporal dentro do sistema, baseando-se na função de distribuição de probabilidade. De forma resumida, a cada passo é sugerido uma mudança aleatória no sistema e então é sorteado um número aleatório para verificar, de acordo com a probabilidade inscrita no sistema, se a nova configuração será aceita ou se o sistema voltará para a configuração anterior. A cada passo são coletados dados para que se obtenha os valores médios (ou esperados).

No [capítulo 1](#) será demonstrado uma construção matemática do ensemble canônico para a obtenção dos valores médios de energia, capacidade térmica, magnetização e suscetibilidade magnética. No [capítulo 2](#) será apresentado a solução do modelo de Ising em uma dimensão e uma breve explicação do modelo em duas dimensões. No [capítulo 3](#) haverá uma breve discussão sobre o método de Monte Carlo com ênfase no algoritmo de metrópolis, baseando-se na confecção do algoritmo utilizado neste trabalho, que pode ser visto no [apêndice A](#). Os resultados serão apresentados no [capítulo 4](#). Fechando o trabalho com algumas [conclusões](#)

Capítulo 1

Ensemble Canônico

Como este trabalho foi realizado a partir do estudo de valores probabilísticos, fornecidos a partir de simulações que fazem uso de números aleatórios, faz-se necessário definir as grandezas físicas em termos de densidades de probabilidades. Neste sentido, serão apresentados neste capítulo o cálculo da capacidade térmica e da suscetibilidade magnética a partir de valores probabilísticos da energia e magnetização, respectivamente. Além disso, serão apresentados uma revisão de termodinâmica e o cálculo da capacidade térmica, a partir da energia, de forma analítica. Assim como, o cálculo da suscetibilidade magnética a partir da magnetização de um dado material.

1.1 Revisão de Termodinâmica [1]

Em termodinâmica, a variação de energia livre pode ser descrita como a diferença entre o calor recebido Q e o trabalho realizado W_{int} , ou seja,

$$dE = Q - W_{int}, \quad (1.1)$$

sendo que o calor recebido é dado por $Q = TdS$ e o trabalho realizado por $W_{int} = pdV$, onde, dS é a variação da entropia (também conhecido como grau de desordem), T a temperatura, p a pressão e dV a variação de volume. Como no modelo de Ising o volume é constante, pode-se dizer que o trabalho interno é nulo, e assim, reescrever dE da seguinte forma, $(dE)_V = TdS$ obtendo,

$$\left(\frac{dE}{dS}\right)_V = T. \quad (1.2)$$

A partir dessa definição de E , é possível calcular a capacidade térmica, que relaciona o calor recebido e a variação de temperatura. A capacidade térmica possui valores diferentes no caso do volume ser constante e no caso onde a pressão é constante. Em simulações computacionais é mais fácil simular sistemas onde o volume é constante, sendo então aplicado o primeiro caso. Em pesquisas realizadas em laboratório é mais fácil se manter a pressão constante, tornando o segundo caso mais adequado. A capacidade térmica a volume constante pode ser escrito como

$$C_V = \frac{Q}{\Delta T}, \quad (1.3)$$

agora, utilizando ΔT em porções infinitesimais, e lembrando que o calor recebido, a volume constante, pode ser escrito como $Q = (dE)_V$ pode-se reescrever a capacidade

térmica da seguinte forma:

$$C_V = \left(\frac{dE}{dT} \right)_V. \quad (1.4)$$

Será apresentado na próxima seção, a suscetibilidade magnética, e como calculá-la a partir da magnetização.

1.2 Conceitos de Magnetização [2]

No estudo de propriedades macroscópicas dos materiais magnéticos temos os conceitos de magnetização (M), que diz respeito a polarização dos momentos de dipolo magnético (spins) do material, e suscetibilidade magnética (χ), que denota a facilidade dos dipolos de se alinharem a um campo magnético (H), esses materiais podem ser classificados em materiais entre diamagnéticos, paramagnéticos e ferromagnéticos. Os materiais diamagnéticos tendem a apresentar uma magnetização inversa ao campo magnético aplicado, tornando o campo magnético menor perto da região onde se encontra tal material, os valores de χ , desses materiais diamagnéticos, são negativos, sendo que o menor valor possível é -1 [2], encontrados em supercondutores onde a corrente elétrica interna se torna muito forte, fazendo com que a magnetização anule completamente o campo magnético aplicado. Os materiais paramagnéticos são materiais que apresentam apenas uma pequena magnetização na presença de um campo externo, mas logo a perde quando o mesmo é retirado. O χ é positivo e apresenta valores geralmente na ordem de 10^{-4} . Por fim, os materiais ferromagnéticos tendem a alinhar grande parte de seus momentos de dipolo magnéticos na direção do campo aplicado gerando uma grande magnetização, permanecendo com esta magnetização mesmo quando o campo é retirado. Os valores de χ podem ser maiores que 10^5 , uma particularidade desta terceira categoria é a presença de materiais antiferromagnéticos, onde os spins tendem a se alinhar antiparalelamente gerando campos magnéticos muito pequenos, e materiais ferrimagnéticos, um caso intermediário entre os materiais ferromagnéticos e antiferromagnéticos.

Como o valor de χ denota a proporção da magnetização em relação ao campo aplicado, pode ser denotado a partir da seguinte relação $M = \chi H$, que na forma diferencial fica sendo, $dM = \chi dH$, e assim, pode-se definir o valor de χ como sendo:

$$\chi = \frac{dM}{dH} \quad (1.5)$$

Durante o decorrer do trabalho será estudado a transição de um material paramagnético e um material ferromagnético. Os efeitos diamagnéticos por outro lado serão negligenciados.

Tendo realizado a revisão quanto os conceitos termodinâmicos e magnéticos, será calculado, a partir dos valores probabilísticos da energia, o valor médio da energia e o capacidade térmica a volume constante que serão utilizados no decorrer do trabalho.

1.3 O valor médio da energia $\langle E \rangle$ [3]

Consideremos um material em banho térmico, cujo o qual a energia total do sistema é definida como E_0 , temos então que a probabilidade da energia do material ser E_j é a mesma probabilidade do banho térmico se encontrar com energia $E_0 - E_j$, ou seja:

$$\rho_j = c\Omega_r(E_0 - E_j), \quad (1.6)$$

sendo $\Omega_r(E)$ a probabilidade de termos um sistema com energia E e c sendo a constante de normalização, lembrando que $\sum_j \rho_j = 1$. Pode-se aplicar a função \ln na equação (1.6), para obter

$$\ln(\rho_j) = \ln(c) + \ln[\Omega_r(E_0 - E_j)]. \quad (1.7)$$

Expandindo o último termo da equação (1.7) em série de Taylor, isto é,

$$\ln[\Omega_r(E_0 - E_j)] = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{d^n}{dE^n} \ln[\Omega_r(E)] \Big|_{E=E_0} (-E_j)^n \right), \quad (1.8)$$

onde o primeiro termo é uma constante, o segundo termo ($n = 1$) pode ser resolvido a partir da descrição da entropia pela mecânica estatística, $S = k_B \ln(\Omega_r(E))$, e lembrando que $\frac{dS}{dE} = 1/T$, com T sendo a temperatura do banho térmico, tem-se:

$$\frac{d}{dE} \ln[\Omega_r(E_0)] = \frac{1}{k_B} \frac{dS}{dE} = \frac{1}{k_B T}, \quad (1.9)$$

e o terceiro termo, assim como os termos seguintes, deverá ser nulo pois a temperatura T é praticamente constante, ou seja:

$$\frac{d^2}{dE^2} \ln[\Omega_r(E_0)] = \frac{1}{k_B} \frac{d}{dE} \left(\frac{1}{T} \right) = 0, \quad (1.10)$$

e assim é possível reescrever a equação (1.7) da seguinte forma:

$$\ln \rho_j = \ln[c\Omega_r(E_0)] - \frac{E_j}{k_B T}. \quad (1.11)$$

Como $\Omega_r(E_0)$ é constante, pode-se escrever:

$$\rho_j = C e^{-\frac{E_j}{k_B T}}, \quad (1.12)$$

tal que C é obtido pela condição de normalização

$$\sum_j \rho_j = \sum_j C e^{-\frac{E_j}{k_B T}} = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sum_j e^{-\frac{E_j}{k_B T}}}. \quad (1.13)$$

define-se a somatória

$$Z = \sum_j e^{-\frac{E_j}{k_B T}} \quad (1.14)$$

como a função de partição, sendo essa a responsável pela normalização de ρ_j , e, por simplicidade, pode-se definir a temperatura inversa $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

A partir da derivada do logaritmo de Z , é obtido o valor médio da energia:

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln[Z] = -\frac{d}{dZ} \ln[Z] \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_j e^{-\beta E_j} = \frac{1}{Z} \sum_j E_j e^{-\beta E_j} = \sum_j E_j \rho_j = \langle E \rangle, \quad (1.15)$$

Uma nova derivada nos leva a seguinte relação,

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \langle E_j \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right] = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} + \frac{\partial}{\partial \beta} Z^{-1} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad (1.16)$$

onde, resolvendo as derivadas,

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \langle E_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_j E_j^2 e^{-\beta E_j} - \left(\frac{1}{Z} \sum_j E_j e^{-\beta E_j} \right)^2. \quad (1.17)$$

De acordo com a equação (1.15), pode-se utilizar a equação (1.17) para descrever o desvio padrão da energia,

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \langle E_j \rangle = \langle E_j^2 \rangle - \langle E_j \rangle^2 = \left\langle (E_j - \langle E_j \rangle)^2 \right\rangle. \quad (1.18)$$

Partindo das equações (1.4) e (1.18), é possível reescrever a capacidade térmica em termos do desvio padrão da energia

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} \langle E_j \rangle = \frac{\langle E_j \rangle^2 - \langle E_j^2 \rangle}{k_B T^2}. \quad (1.19)$$

1.4 Magnetização e suscetibilidade magnética

Considerando agora que nosso material está sendo submetido a um campo magnético H , e possui N partículas com spin $1/2$ apontando aleatoriamente para cima ou para baixo, temos que o Hamiltoniano¹ tem contribuição $+\mu_0 H$ por cada spin para cima e contribuição $-\mu_0 H$ por cada spin para baixo, assim sendo, o Hamiltoniano pode ser escrito da forma:

$$\mathcal{H} = \mu_0 H \sum_j^N \sigma_j \quad (1.20)$$

e assim, a função de partição é dada por:

$$Z = \sum_j e^{\beta E_j} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_j} e^{(\beta \mu_0 H \sum_j^N \sigma_j)}, \quad (1.21)$$

onde a somatória engloba todas as combinações possíveis dos spins $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_j$. E assim, é possível calcular a magnetização média m como sendo:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \langle \mu_0 \sum_j^N \sigma_j \rangle = \frac{1}{ZN} \mu_0 \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_j} \sum_j^N \sigma_j e^{(\beta \mu_0 H \sum_j^N \sigma_j)}, \quad (1.22)$$

e, comparando com a derivada de $\ln[Z]$ em relação a H ,

$$\frac{\partial}{\partial H} \ln[Z] = \frac{d}{dZ} \ln[Z] \frac{\partial}{\partial H} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_j} e^{(\beta \mu_0 H \sum_j^N \sigma_j)} = \frac{1}{Z} \beta \mu_0 \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_j} e^{(\beta \mu_0 H \sum_j^N \sigma_j)} \sum_j^N \sigma_j, \quad (1.23)$$

pode-se relacionar a magnetização média com a função de partição, obtendo

$$\langle m \rangle = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial H} \ln[Z] = \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dH}. \quad (1.24)$$

¹O Hamiltoniano é a soma de todas as energias do sistema, seja ela cinética, magnética, térmica ou potencial.

É possível encontrar o valor de χ a partir das equações (1.5) e (1.24):

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_T = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial H} \right) = \frac{1}{\beta N} \left(\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dH^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{dZ}{dH} \right)^2 \right), \quad (1.25)$$

e analogamente à equação (1.18) podemos reescrever a equação (1.25) da seguinte forma:

$$\chi = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{k_B T} \quad (1.26)$$

Capítulo 2

Modelo de Ising

Para a solução do modelo de Ising em duas dimensões, serão apresentados conceitos, como a energia e magnetização proporcionada por tal modelo. E, para uma melhor compreensão, será solucionado o modelo de Ising em uma dimensão.

Será também estudado a transição de segunda ordem, de um material paramagnético para um ferromagnético, que pode ser observada no modelo de Ising em duas dimensões.

2.1 O modelo

O modelo de Ising tem como objetivo explicar as características de uma rede devido interações entre momentos de dipolo magnéticos, seus respectivos primeiros vizinhos, e um campo magnético externo, H . Esses dipolos magnéticos podem ser considerados como spins. A energia da rede é descrita por,

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i H \sigma_i, \quad (2.1)$$

onde, J é o fator de interação entre spins vizinhos, o primeiro somatório é realizado em todos os conjuntos de primeiros vizinhos e o segundo somatório em todos os spins. Os spins σ podem assumir dois valores, $+1$ quando voltado para cima e -1 quando voltado para baixo. O valor de J pode identificar se o material possui características ferromagnéticas ou antiferromagnéticas, onde no primeiro caso $J > 0$ leva a minimização da energia quando os spins se alinham paralelamente. Enquanto o alinhamento antiparalelo tem a energia minimizada com $J < 0$. Lembrando que os efeitos ferromagnéticos se fazem presentes em temperaturas abaixo da temperatura de Curie, como será visto no decorrer do trabalho. Por simplicidade serão trabalhados apenas casos onde o campo externo H é nulo, tendo assim, apenas a magnetização espontânea do material.

2.2 Solução em uma dimensão

Considerando-se uma rede em uma dimensão, temos que, cada par de spins pode assumir 4 configurações diferentes, sendo elas:

$$1 : \uparrow\uparrow \quad 2 : \uparrow\downarrow \quad 3 : \downarrow\uparrow \quad 4 : \downarrow\downarrow$$

e, partindo da equação (2.1), lembrando que o campo H é nulo, pode-se calcular a energia de cada uma destas configurações:

$$\begin{aligned} E_1 &= E_{\uparrow\uparrow} = -J(+1)(+1) = -J; \\ E_2 &= E_{\uparrow\downarrow} = -J(+1)(-1) = +J; \\ E_3 &= E_{\downarrow\uparrow} = -J(-1)(+1) = +J; \\ E_4 &= E_{\downarrow\downarrow} = -J(-1)(-1) = -J. \end{aligned}$$

E com isso, é possível encontrar a função de partição de uma rede unidimensional. Partindo de um exemplo mais simples, tem-se uma rede de N spins com as extremidades soltas, isto é, σ_1 ligado apenas a σ_2 , e σ_N ligado apenas a σ_{N-1} . Neste sentido, usando a equação (2.1), obtém-se a função de partição (1.14)

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} \sum_{\sigma_N=\pm 1} \left(\exp \left[\sum_{i=1}^{N-1} \beta J \sigma_i \sigma_{i+1} \right] \right), \quad (2.2)$$

lembrando que $e^{a+b+c+\dots} = e^a e^b e^c$, é possível reescrever a equação (2.2), como

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} \sum_{\sigma_N=\pm 1} [e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2} \dots e^{\beta J \sigma_{N-2} \sigma_{N-1}} e^{\beta J \sigma_{N-1} \sigma_N}]. \quad (2.3)$$

Expandindo o somatório em σ_N ,

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} [e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2} \dots e^{\beta J \sigma_{N-2} \sigma_{N-1}} (e^{\beta J \sigma_{N-1}} + e^{-\beta J \sigma_{N-1}})] \quad (2.4)$$

e então, utilizando-se que $\cosh a = \frac{e^a + e^{-a}}{2}$, tem-se

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} \left\{ e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2} \dots e^{\beta J \sigma_{N-2} \sigma_{N-1}} 2 \cosh [\beta J \sigma_{N-1}] \right\}, \quad (2.5)$$

como a função $\cosh(x)$ é uma função par, é possível expandir novamente a função de partição só que, desta vez, em termos de σ_{N-1} , para obter

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-2}=\pm 1} [e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2} \dots e^{\beta J \sigma_{N-3} \sigma_{N-2}} (e^{\beta J \sigma_{N-2}} 2 \cosh [\beta J] + e^{-\beta J \sigma_{N-2}} 2 \cosh [-\beta J])] \quad (2.6)$$

escrevendo $e^{\beta J \sigma_{N-2}} + e^{-\beta J \sigma_{N-2}} = 2 \cosh [\beta J \sigma_{N-2}]$ e reagrupando a equação

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-2}=\pm 1} [e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2} \dots e^{\beta J \sigma_{N-3} \sigma_{N-2}} 2 \cosh [\beta J \sigma_{N-2}] 2 \cosh [\beta J]] \quad (2.7)$$

repetindo esse processo $N - 1$ vezes,

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} 2 \cosh [\beta J \sigma_1] (2 \cosh [\beta J])^{N-2} \quad (2.8)$$

restando apenas resolver o somatório referente a σ_1 . A equação (2.8) pode ser reescrita como

$$Z = 2(2 \cosh [\beta J]) (2 \cosh [\beta J])^{N-2} = 2(2 \cosh [\beta J])^{N-1} \quad (2.9)$$

Sobre a mudança de contorno. A função de partição para uma rede unidimensional, limitadas por uma condição periódica de contorno, isto é, com os spins σ_1 e σ_N interligados

(imagine a rede com o formato de uma anel), pode ser resolvida partindo de uma equação similar a (2.2). Mas, como existe uma ligação entre os spins σ_1 e σ_N , e utilizando $N+1 = 1$, a equação se torna

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} \sum_{\sigma_N=\pm 1} (\exp[\sum_{i=1}^N \beta J \sigma_i \sigma_{i+1}]), \quad (2.10)$$

utilizando novamente a relação $e^{a+b+c+\dots} = e^a e^b e^c$, podemos reescrever a equação, mas agora em termos de um produtório, como

$$Z = \sum_{\sigma_i=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta J \sigma_i \sigma_{i+1}}. \quad (2.11)$$

Para solucionar tal produtório, é necessário reescrever a equação (2.11), a partir da matriz de transferência construída utilizando-se os valores possíveis de energia, para uma combinação qualquer de spins, tal qual

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{E_{\uparrow\uparrow}} & e^{E_{\uparrow\downarrow}} \\ e^{E_{\downarrow\uparrow}} & e^{E_{\downarrow\downarrow}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

onde, ao se diagonalizar a matriz \mathbf{T} , obtém-se a matriz \mathbf{D} , descrita como

$$\mathbf{D} = \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \cosh \beta J & 0 \\ 0 & 2 \sinh \beta J \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

com λ_1 e λ_2 sendo os autovalores de \mathbf{T} . E assim, como cada par de spins possuem as mesmas possibilidades de energia, a função de partição (2.10) pode ser descrita pelo traço do produto de N matrizes \mathbf{D} , obtendo

$$Z = \text{Tr}(\mathbf{D}^N) \quad (2.14)$$

onde, os autovalores de \mathbf{T} são λ_1^N e λ_2^N , e com isso, a função de partição se torna

$$Z = 2^N (\cosh^N[\beta J] + \sinh^N[\beta J]). \quad (2.15)$$

Em uma rede macroscópica ($N \rightarrow \infty$), lembrando que \sinh é menor que \cosh , podemos reescrever o valor de Z como,

$$Z = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \Big|_{N \rightarrow \infty} \approx \lambda_1^N \Big|_{N \rightarrow \infty} = 2^N \cosh^N[\beta J] \Big|_{N \rightarrow \infty} \quad (2.16)$$

condizendo com o valor obtido no caso de pontas soltas, ao se considerar o sistema macroscópico. Assim sendo, os cálculos relacionados à capacidade térmica utilizarão a função de partição com as pontas soltas.

Partindo da equação (1.15) e da função de partição (2.9), obtêm-se

$$\langle E \rangle = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln[2(2 \cosh[\beta J])^{N-1}] \quad (2.17)$$

que, resolvendo a derivada, pode ser escrita como

$$\langle E \rangle = - \frac{1}{2(2 \cosh[\beta J])^{N-1}} 2(N-1)(2 \cosh[\beta J])^{N-2} 2J \sinh[\beta J], \quad (2.18)$$

agrupando-se os termos e aplicando propriedades trigonométricas hiperbólicas, o valor médio da energia em termos da temperatura é

$$\langle E \rangle = -J(N-1) \tanh[\beta J], \quad (2.19)$$

demonstrado no gráfico 2.1a.

Utilizando-se das equações (1.19) e (2.19), podemos escrever a capacidade térmica como sendo

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} J(N-1) \tanh[\beta J] \\ C_V &= \frac{J^2(N-1)}{k_B T^2} \frac{1}{\cosh^2[\beta J]}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

demonstrado no gráfico 2.1b.

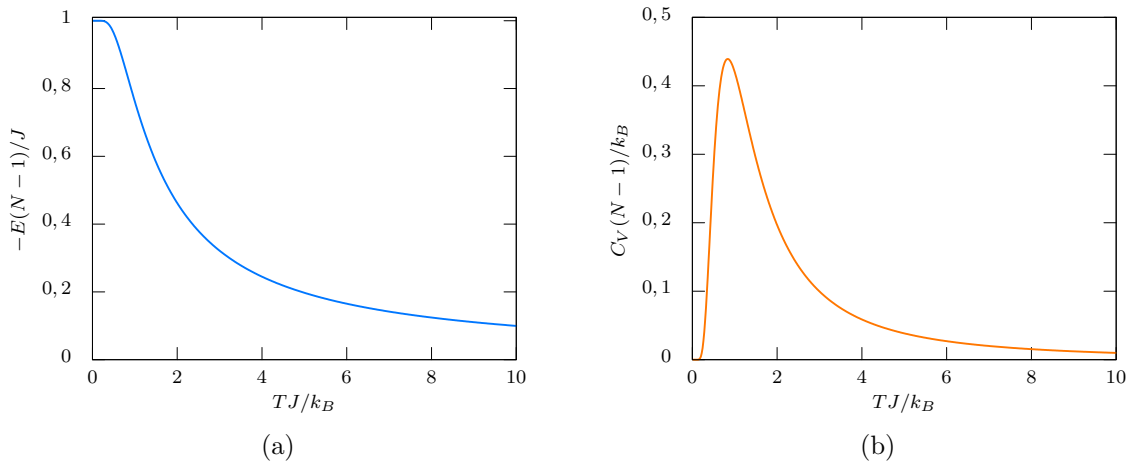


Figura 2.1: Valor médio da energia e capacidade térmica em relação à temperatura.

Para se estudar a magnetização no caso unidimensional, será trabalhado agora o sistema onde se tem um campo magnético aplicado H . E então, será visto se permanece alguma magnetização espontânea no sistema ao se retirar este campo magnético.

Neste caso, serão utilizadas as condições periódicas de contorno, onde, a partir da função (2.1), a função de partição (1.14) é escrita como

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \sum_{\sigma_{i+1} = \pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta[J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{H}{2}(\sigma_i\sigma_{i+1})]}, \quad (2.21)$$

onde, o segundo termo é dado por $\frac{H}{2}$, pois cada spin contribui para a energia em dois pares distintos. A matriz de transferência relacionada a esta função é

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

tendo como autovalores $\lambda_1 = e^{\beta J} \cosh[\beta H] + (e^{2\beta J} \cosh^2[\beta H] - 2 \sinh[2\beta J])^{1/2}$ e $\lambda_2 = e^{\beta J} \cosh[\beta H] - (e^{2\beta J} \cosh^2[\beta H] - 2 \sinh[2\beta J])^{1/2}$. Assim, a função de partição para N partículas, lembrando que $Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N$, pode ser escrito como,

$$\begin{aligned} Z &= \left(e^{\beta J} \cosh[\beta H] + (e^{2\beta J} \cosh^2[\beta H] - 2 \sinh[2\beta J])^{1/2} \right)^N + \\ &\quad \left(e^{\beta J} \cosh[\beta H] - (e^{2\beta J} \cosh^2[\beta H] - 2 \sinh[2\beta J])^{1/2} \right)^N \end{aligned} \quad (2.23)$$

utilizando-se de cálculos semelhantes aos realizados em (2.16), pode-se reescrever a equação (2.23) na seguinte forma:

$$Z = \lambda_1^N = \left(e^{\beta J} \cosh[\beta H] + (e^{2\beta J} \cosh^2[\beta H] - 2 \sinh[2\beta J])^{1/2} \right)^N \quad (2.24)$$

e, a partir de (1.24), o valor da magnetização, em relação a λ_1 pode ser descrito como sendo

$$\langle m \rangle = \frac{1}{\lambda_1^N} \frac{\partial \lambda_1^N}{\partial \lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial H}, \quad (2.25)$$

tendo como base as equações (2.24) e (2.25) e realizando as derivadas, obtêm-se:

$$\langle m \rangle = \frac{N\beta}{e^{\beta J} \cosh[\beta H] + (e^{2\beta J} \cosh^2[\beta H] - 2 \sinh[2\beta J])^{1/2}} \left[e^{\beta J} \sinh[\beta H] + \frac{e^{2\beta J} \sinh[2\beta H]}{2(e^{2\beta J} \cosh^2[\beta H] - 2 \sinh[2\beta J])^{1/2}} \right] \quad (2.26)$$

e, a partir de algumas manipulações algébricas, a equação (2.26) pode ser reescrita na forma simplificada

$$\langle m \rangle = \frac{N\beta \sinh[\beta H]}{\sqrt{\sinh^2[\beta H] + e^{-4\beta J}}} \quad (2.27)$$

onde, pode ser visto que ao se retirar o campo magnético atuante, a magnetização vai a zero, independente da temperatura inversa (β) e das características do material (J), e isso implica que o modelo de Ising unidimensional não consegue explicar a transição de fase entre materiais paramagnéticos e ferromagnéticos.

Tal fenômeno pode ser entendido partindo de um sistema, regido pela condição periódica de contorno, que, no estado fundamental, possua N spins voltados para cima. Em um segundo caso, se os spins σ_i até $\sigma_{i+N/2}$ se voltarem para baixo, o sistema possuirá energia $-(N-4)J$ e magnetização nula. Além desse, existem muitos outros casos onde a magnetização vai a zero, ou muito próximo, com um pequeno incremento na energia. Como, para sistema muito grandes, a diferença de energia entre as situações é muito pequena, existe uma grande probabilidade do sistema passar de uma situação para outra, demonstrando uma grande instabilidade, tornando muito difícil o sistema se manter com um alto valor de magnetização, o que não ocorre em duas dimensões que apresenta uma diferença de energia muito maior entre os dois casos.

A solução exata para o modelo de Ising em duas dimensões, no que se diz respeito a energia e a capacidade térmica, foi apresentada por Onsager em 1943 [10]. A partir de tal solução, é possível ver que a capacidade térmica diverge quando a rede se encontra próxima à transição de fase, temperatura de Curie, e ao se aumentar o tamanho de rede se obtêm picos mais altos e estreitos. tendo isso em mente, ao considerarmos o limite termodinâmico, a capacidade térmica da rede possuirá um pico praticamente infinito em uma temperatura muito bem definida.

2.3 Dimensionamento em escala finita

Ao se resolver o modelo de ising dentro de uma escala finita, é percebido uma grande limitação. A suscetibilidade magnética e a capacidade térmica, que deveriam divergir na temperatura crítica, apenas apresentam um pico, onde em redes menores é mais suave e

em redes maiores torna-se mais abrupto, tornando mais difícil o cálculo da temperatura crítica em si. Por outro lado, ao se utilizar de métodos probabilísticos, como o método de Monte Carlo, torna-se impossível a solução de dados a partir de uma rede infinita. Para contornar estes problemas, uma solução viável é extrapolar os dados obtidos a partir de redes finitas. Tal método é conhecido como dimensionamento em escala finita.

Para estudar o comportamento do sistema próximo a temperatura crítica, é útil definir os seguintes expoentes críticos que correlacionam os valores máximos da suscetibilidade magnética (χ), magnetização (M), capacidade térmica (C_V) e comprimento de correlação (ξ) com a diferença entre a temperatura de transição e a temperatura de Curie (T_c). Os expoentes críticos podem ser vistos nas seguintes relações:

$$\xi(T) \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad (2.28)$$

$$M(T) \sim (T - T_c)^\beta \quad (2.29)$$

$$C_V(T) \sim |T - T_c|^{-\alpha} \quad (2.30)$$

$$\chi(T) \sim |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (2.31)$$

Pode ser visto também que quanto maior o tamanho da rede, mais o valor da temperatura onde se ocorre a transição de fase se aproxima da temperatura de Curie, ou seja, $|T - T_c| \ll 1$ quando $L \rightarrow \infty$. Pode-se então aplicar um expoente crítico para o tamanho da rede, produzindo

$$L(T) \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad (2.32)$$

que pode ser utilizado nas equações (2.28) à (2.31) para se obter

$$\xi(T) \sim |T - T_c|^{-\nu} \rightarrow L \quad (2.33)$$

$$M(T) \sim (T - T_c)^\beta \rightarrow L^{-\beta/\nu} \quad (2.34)$$

$$C_V(T) \sim |T - T_c|^{-\alpha} \rightarrow L^{\alpha/\nu} \quad (2.35)$$

$$\chi(T) \sim |T - T_c|^{-\gamma} \rightarrow L^{\gamma/\nu}. \quad (2.36)$$

Em uma rede de duas dimensões, os valores teóricos dos expoentes críticos são, $\nu = 1$, $\beta = 0,125$, $\gamma = 1,175$ e $\alpha = 0$ [3, 11], e serão comparados com os valores obtidos durante a execução do presente trabalho.

Devido a complexabilidade dos cálculos referentes a rede bidimensional, será apresentado agora o método de Monte Carlo, utilizado para se obter a solução numérica.

Capítulo 3

Solução Numérica

Uma das grandes dificuldades em se resolver o modelo de Ising em duas dimensões é definir a função de partição. Dado isso, é conveniente utilizar-se de um algoritmo que elimine a necessidade de tal cálculo, assim como o algoritmo de Metrópolis. Esse algoritmo trabalha apenas com a probabilidade do sistema passar de um estado para outro a partir da razão entre as probabilidades do sistema se encontrar em cada um destes estados. Neste sentido, a probabilidade do sistema passar de um estado i para um estado j , partindo da equação (1.12), é dado por

$$W_{i \rightarrow j} = \frac{\rho_j}{\rho_i} = \frac{C e^{-\beta E_j}}{C e^{-\beta E_i}} = e^{\beta(E_i - E_j)}, \quad (3.1)$$

ou seja, a probabilidade do sistema passar do estado i para o estado j depende apenas das energias nestes respectivos estados e da temperatura do sistema. Tendo por definição a máxima probabilidade sendo 1, e definindo $\Delta E = E_j - E_i$, deve-se reescrever a equação (3.1) como sendo

$$W_{i \rightarrow j} = \begin{cases} e^{-\beta \Delta E} & \text{se } \Delta E > 0, \\ 1 & \text{se } \Delta E \leq 0. \end{cases} \quad (3.2)$$

Com base no algoritmo de Metrópolis, será apresentado agora os passos utilizados no programa para a solução do Modelo de Ising bidimensional, note que os valores aleatórios obtidos são todos entre 0 e 1, distribuídos uniformemente.

Para que o programa seja realizado sem nenhuma tendência inicial, é construída uma rede quadrada definindo a orientação de cada spins utilizando uma forma totalmente aleatória, isso pode ser realizado sorteando-se um numero aleatório para cada spin e definindo como orientação positiva (para cima) valores superiores a 0,5 e orientação negativa (para baixo) valores inferiores a 0,5. Tendo a rede montada, deve-se então coloca-la em um estado de equilíbrio e, para isto, o processo realizado é sortear um spin aleatório, calcula-se então a variação de energia caso este spin seja rotacionado, e a partir da equação (3.2) será decidido se a alteração se mantêm.

Como neste trabalho será realizado apenas a transição de um spin de cada vez, tem-se apenas 5 casos possíveis, ou seja, será necessário calcular cinco variações de energia diferentes, utilizando como exemplo um spin voltado para cima, temos primeiramente o caso onde todos seus vizinhos estejam voltados para cima, com energia $E_i = -4J$

$$E_i = -4J \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \uparrow \uparrow \uparrow \\ \uparrow \end{array} \Rightarrow E_j = 4J \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \\ \uparrow \end{array}$$

tendo assim uma variação de energia $\Delta E = 8J$. No segundo caso, apenas um spin está voltado para baixo, a energia então é dada por $E_i = -2J$

$$E_i = -2J \begin{array}{c} \downarrow \\ \uparrow \uparrow \uparrow \\ \uparrow \end{array} \Rightarrow E_j = 2J \begin{array}{c} \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \\ \uparrow \end{array}$$

e sua variação de energia é $\Delta E = 4J$. No terceiro caso, tem-se dois spins voltados para baixo, a energia então é dada por $E_i = 0$

$$E_i = 0 \begin{array}{c} \downarrow \\ \downarrow \uparrow \uparrow \\ \uparrow \end{array} \Rightarrow E_j = 0 \begin{array}{c} \downarrow \\ \downarrow \downarrow \uparrow \\ \uparrow \end{array}$$

e sua variação de energia é $\Delta E = 0$. No quarto caso, apenas um spin está voltado para cima, a energia então é dada por $E_i = 2J$

$$E_i = 2J \begin{array}{c} \downarrow \\ \downarrow \uparrow \uparrow \\ \downarrow \end{array} \Rightarrow E_j = -2J \begin{array}{c} \downarrow \\ \downarrow \downarrow \uparrow \\ \downarrow \end{array}$$

e sua variação de energia é $\Delta E = -4J$. No quinto caso, todos os spins estão voltados para baixo, a energia então é dada por $E_i = -4J$

$$E_i = 4J \begin{array}{c} \downarrow \\ \downarrow \uparrow \downarrow \\ \downarrow \end{array} \Rightarrow E_j = -4J \begin{array}{c} \downarrow \\ \downarrow \downarrow \downarrow \\ \downarrow \end{array}$$

e sua variação de energia é $\Delta E = -8J$.

Perceba que a partir de (3.2) pode-se concluir que nos três últimos casos a rotação do spin é automaticamente aceita. Nos outros casos é gerado um número aleatório, caso o número obtido seja menor que $e^{-\beta\Delta E}$ então a nova configuração é aceita, caso contrário é retornado à configuração anterior. Este processo deve ser realizado várias vezes, uma média de mil vezes o número de spins, a fim de se obter uma configuração compatível com a temperatura. Esse passo é chamado de transiente e ajusta o sistema para uma melhor coleta de dados.

Tendo a rede montada, o passo seguinte é o cálculo da energia e magnetização iniciais. Para o cálculo da energia inicial, pode-se somar as energias de interação entre todos os spins da rede com seus vizinhos da direita e de baixo, sendo esse processo equivalente a somar a interação com seus quatro primeiros vizinhos, de uma forma mais eficiente. Onde, em vez de se somar todas as interações e dividir a energia por 2, pois a energia de interação de cada par de spins será mensurado duas vezes, a energia do sistema é mensurada na metade dos passos. Para a magnetização, tendo os valores de spin como +1 em spins voltados para cima e -1 em spins voltados para baixo, basta somar todos os valores de spin e se obterá o número de spins vezes a magnetização. Com esses valores iniciais, pode-se então partir para a simulação do sistema que, no presente trabalho, foi realizado na seguinte ordem:

1. Sorteia-se um spin aleatoriamente, é então calculado a variação de energia caso este spin seja rotacionado, e então:
 - (a) se a variação de energia for $\Delta E \leq 0$, é aceita a nova configuração do sistema;

- (b) se a variação de energia for $\Delta E > 0$, é sorteado um número aleatório e caso este número seja menor que $e^{-\beta\Delta E}$ a rotação é aceita. Caso o número sorteado seja maior que $e^{-\beta\Delta E}$ o sistema se mantém no estado original.
2. Caso tenha ocorrido a rotação do spin, a energia e a magnetização são recalculados. Usa-se neste caso $E_j = E_i + \Delta E$ e $M_j = M_i + 2s_j$, com E_i (M_i), E_j (M_j) sendo a energia (magnetização) antes e depois da rotação do spin para o estado s_j .
 3. Os valores da energia e da magnetização são armazenados na forma somatória, sendo a magnetização tendo considerado apenas o seu valor absoluto. Para o uso posterior nas equações (1.19) e (1.26), são armazenados também os valores ao quadrado da energia e da magnetização. Por exemplo, serão criadas as variáveis E_1 e E_2 , onde $E_1 = \sum_i E_{iT}$ e $E_2 = \sum_i E_{iT}^2$, com T sendo a temperatura do presente ciclo, i a quantia de spins sorteados na temperatura T e E_{iT} é a i -ésima energia obtida na temperatura T .
 4. Os passos 1 a 3 são repetidos N vezes, onde N é a quantidade de spins na rede. Isto é considerado um passo de Monte Carlo, que equivale a uma medida realizada no sistema inteiro.
 5. O passo 4 é repetido de acordo com a precisão desejada, assim como em um laboratório deve-se repetir um determinado experimento a fim de se obter um melhor resultado. Sendo essas repetições definidas como a quantia de passos de Monte Carlo realizados. No presente trabalho foram realizados 100 mil passos de Monte Carlo.
 6. Para se obter o valor médio, do sistema, de cada variável obtida no passo 3, deve se dividir os valores obtidos pela quantia de passos de Monte Carlo e por N .
 7. Tendo $\langle E \rangle$, $\langle E^2 \rangle$, $\langle M \rangle$ e $\langle M^2 \rangle$, é então calculado os valores da capacidade térmica C_V e da suscetibilidade magnética χ utilizando-se as equações (1.19) e (1.26). Os valores de $\langle E \rangle$, $\langle M \rangle$, C_V e χ são divididos por N , obtendo-se os respectivos valores por spin, para que possam ser comparados com os resultados obtidos em outros tamanhos de rede. Os dados então são armazenados, com sua respectiva temperatura, para que se possa iniciar uma nova série de medidas.
 8. É adicionado um incremento na temperatura e então os passos anteriores são refeitos. Note que quanto menor o incremento na temperatura, mais suaves serão as curvas dos gráficos obtidos e, conseqüentemente, melhores serão os dados. Por outro lado, o tempo de processamento do programa será maior.
 9. No presente trabalho os passos anteriores foram repetidos entre as temperaturas $T_i = 1$ e $T_f = 3,9$ com uma variação de temperatura $\Delta T = 0.1$ e a energia de interação entre spins $J = 1$.

E assim são mensurados todos os dados importantes para a construção de gráficos e análise de resultados que serão apresentados no capítulo seguinte.

Capítulo 4

Resultados

No presente capítulo serão apresentados os gráficos, da energia, da capacidade térmica, da magnetização e da suscetibilidade magnética, obtidos a partir do programa apresentado no apêndice A, confeccionado para solucionar o modelo de Ising em duas dimensões a partir do algoritmo de metrópoles.

4.1 Valores de Energia e Capacidade Térmica

A figura 4.1 apresenta a energia média encontrada entre as temperaturas $T_i = 1,0$ e $T_f = 3,9$, tendo a variação de temperatura de $\Delta T = 0,1$, com os tamanhos de rede 2×2 , 5×5 , 10×10 e 100×100 . Onde, quanto maior o tamanho da rede, mais intenso se torna o aumento de energia, tendo um limite em aproximadamente $E/J = -0,4$, o que não ocorre na rede 2×2 , isso é devido às poucas energias acessíveis. Para baixas temperaturas pode-se notar que os spins tendem a se alinhar, onde a energia por spin é dada por $E/J = -2$

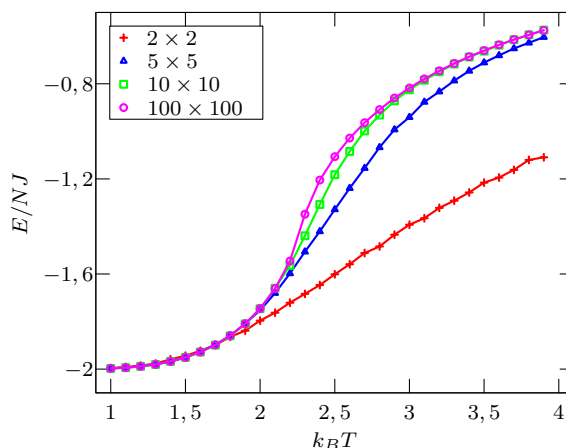


Figura 4.1: Valor médio da energia em relação à temperatura a partir do método de Monte Carlo para as redes 2×2 , 5×5 , 10×10 e 100×100 .

a capacidade térmica pode ser visualizado na figura 4.2, onde, pode-se perceber que quanto maior o tamanho da rede mais alto e estreito se torna o pico, assim como previsto por Onsanger [10], sendo que esse pico ocorre na transição de fase. Com base nas curvas

apresentadas na figura 4.2 pode-se presumir que, no limite termodinâmico, a capacidade térmica deve divergir na transição de fase. Sendo a capacidade térmica a derivada primeira da energia livre de Helmholtz e tendo que seu valor diverge, podemos dizer que ocorre aqui uma transição de segunda ordem, isto é, a energia livre de Helmholtz não possui uma segunda derivada.

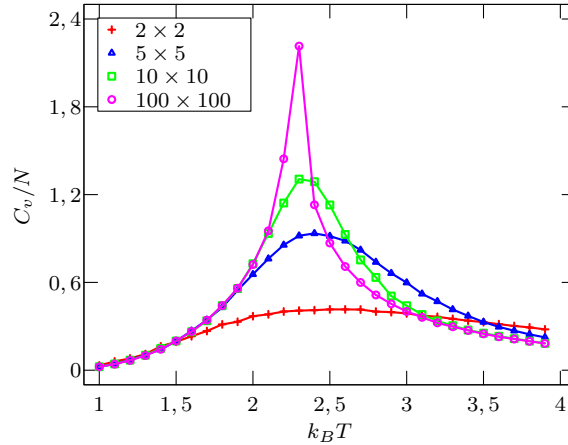


Figura 4.2: Valor da capacidade térmica em relação à temperatura a partir do método de Monte Carlo para as redes 2×2 , 5×5 , 10×10 e 100×100 .

4.2 Valores de Magnetização

Os dados referentes ao valor da magnetização absoluta média foram utilizados para confeccionar a figura 4.3, onde pode ser visto que o tamanho da rede influencia bastante no formato da curva. Em redes menores, a magnetização apresenta uma curva mais suave. Em redes maiores, a magnetização apresenta uma curva mais brusca, se assemelhando a um degrau quando a temperatura se aproxima à T_C .

Foram utilizados apenas os valores absolutos da magnetização pois, em redes muito pequenas, existe uma probabilidade do sistema passar de um estado onde $M = 1$ para um estado totalmente oposto $M = -1$, tornando o valor médio da magnetização muito baixo. Tal efeito se torna menos evidente quando se aumenta o tamanho de rede, como pode ser visto na figura 4.4. Lembrando que a intenção do trabalho é ver em que temperaturas um material apresenta magnetização espontânea, isto é, em qual temperatura ocorre a transição de um material paramagnético para um material ferromagnético.

A suscetibilidade magnética está apresentada na figura 4.5, onde pode-se visualizar que, assim como ocorre na capacidade térmica, em redes maiores o pico se torna mais alto e estreito além do seu valor máximo se localizar cada vez mais próximo da temperatura $T = T_C$.

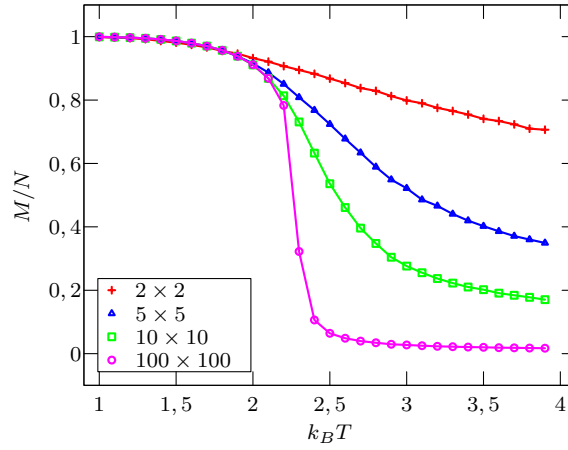


Figura 4.3: Valor da magnetização em relação à temperatura a partir do método de Monte Carlo para as redes 2×2 , 5×5 , 10×10 e 100×100 .

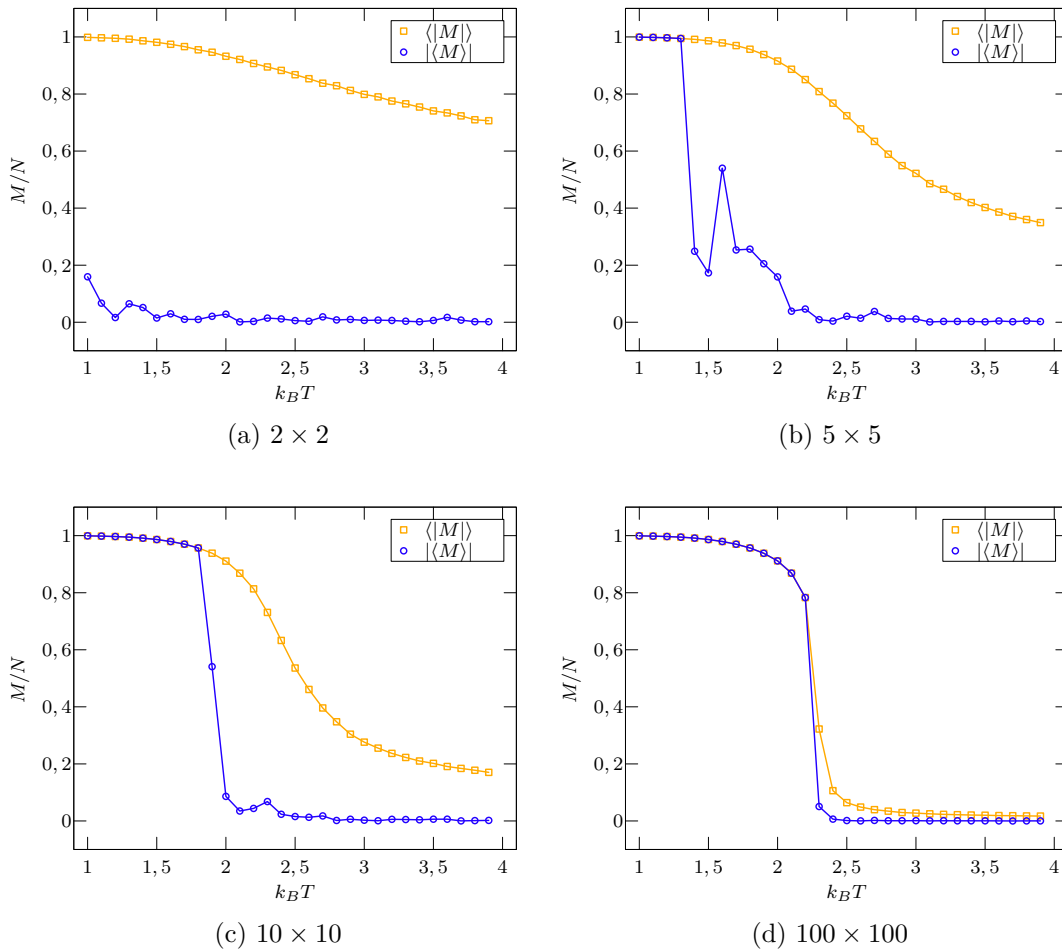


Figura 4.4: Comparação entre o valor médio da magnetização absoluta e o valor absoluto da magnetização média para as redes 2×2 , 5×5 , 10×10 e 100×100 .

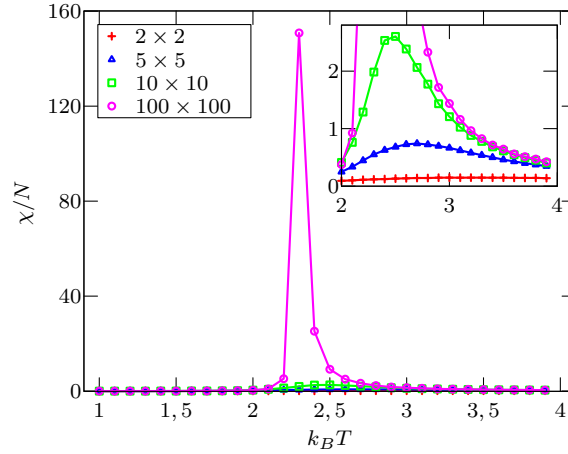


Figura 4.5: Valor da suscetibilidade magnética em relação à temperatura a partir do método de Monte Carlo para as redes 2×2 , 5×5 , 10×10 e 100×100 .

Para uma melhor visualização da formação de domínios, foram confeccionados quatro mapas da rede de momentos de dipolo magnéticos para uma rede 100×100 , quem podem ser vistos na figura 4.6.

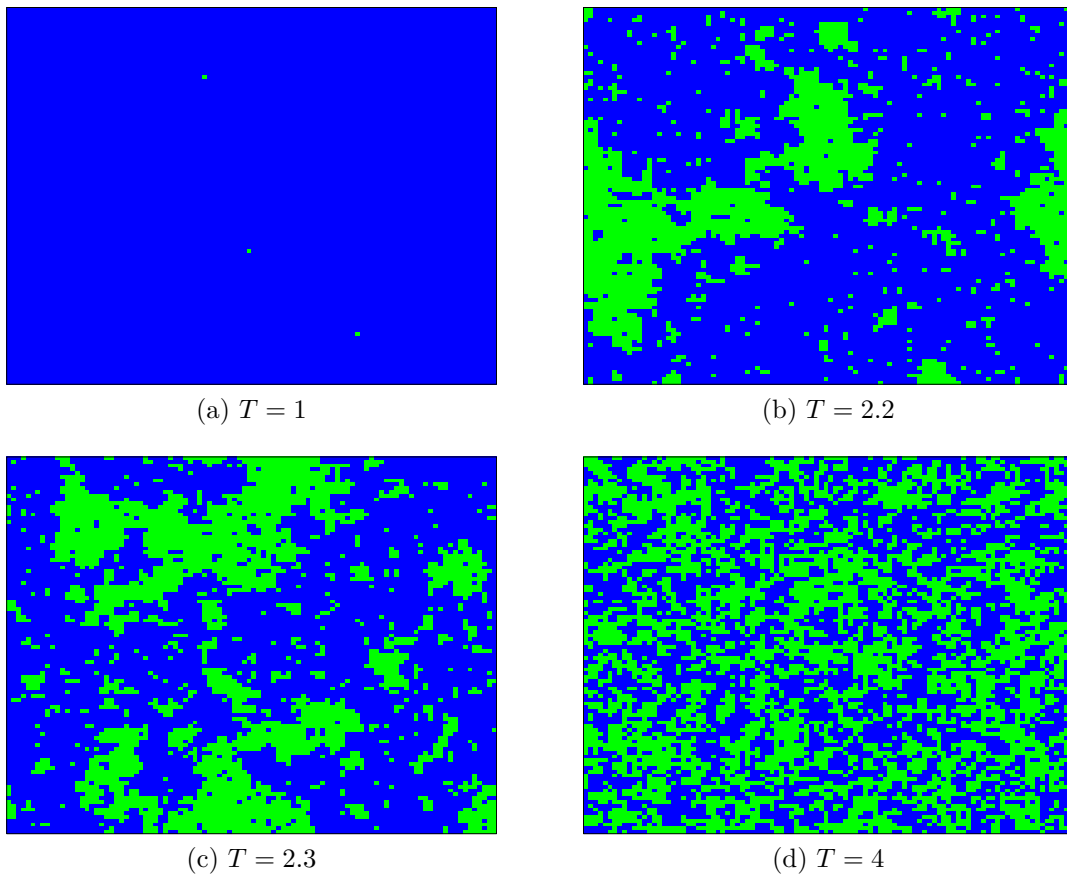


Figura 4.6: Mapas da rede 100×100 confeccionados para a visualização da formação de domínios.

Foi utilizado no primeiro mapa uma temperatura próxima ao equilíbrio ($T = 1$). Quanto ao segundo e o terceiro mapa foram utilizados temperaturas próximas a tempe-

ratura crítica ($T = 2.2eT = 2.3$). No quarto mapa fui utilizada uma temperatura onde o sistema supostamente se encontraria em total desordem ($T = 4$).

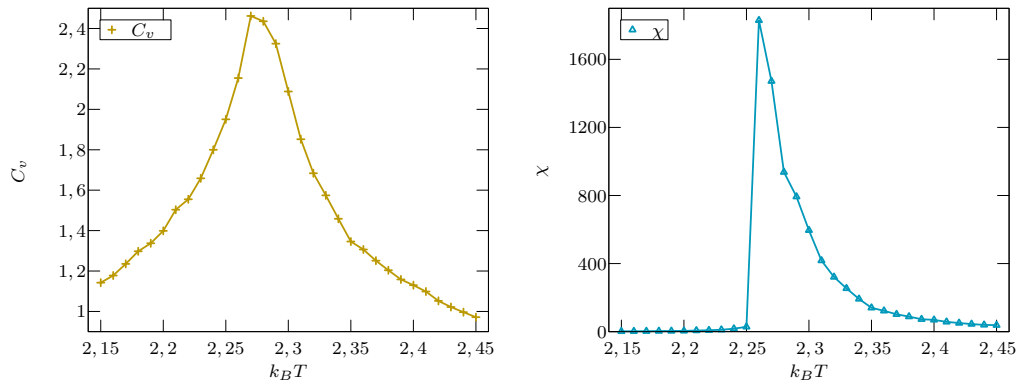
Os dados obtidos agora serão utilizados para a obtenção dos valores dos expoentes críticos e posteriormente a temperatura de Curie.

4.3 Expoentes críticos e temperatura de Curie

Para a obtenção da temperatura de Curie é necessário utilizar-se da equação (2.32), que apresenta a diferença entre a temperatura crítica de uma rede infinita e uma rede finita, e, em uma rede bidimensional, podemos reescrevê-la da seguinte forma:

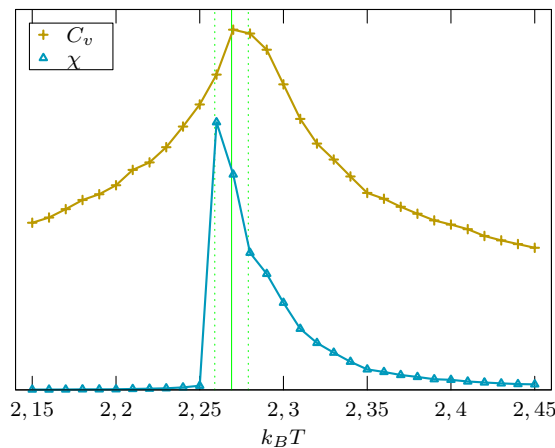
$$T_c = T \pm L^{-1} \quad (4.1)$$

Tendo em vista uma melhor precisão, foi realizada uma nova simulação com a rede 100×100 mas com a variação de temperatura $\Delta T = 0,01$ e 10^6 passos de Monte Carlo, não foram realizados testes com redes maiores pois isto demandaria um tempo de processamento muito elevado.



(a) Capacidade térmica.

(b) Suscetibilidade magnética.



(c) capacidade térmica e suscetibilidade magnética, a linha verde corresponde ao valor teórico de T_c e as linhas verdes pontilhadas equivalem aos valores esperados para uma rede 100×100 .

Figura 4.7: Gráficos utilizados para a obtenção da temperatura crítica.

No gráfico 4.7a é apresentado a capacidade térmica. No gráfico 4.7b pode ser visto a suscetibilidade. O gráfico 4.7c foi confeccionado para uma melhor comparação entre as duas características. A partir destes gráficos foram obtidos os valores de T_c que estão listados tabela 4.1. Como pode ser visto na rede 100×100 , a suscetibilidade magnética aparentemente apresentou um resultado mais preciso em relação ao valor da temperatura crítica quando comparada à capacidade térmica. Porém, pensando em termos da equação 4.1, seria necessário uma rede maior para que os dois valores estimados de uma rede ∞ sejam mais próximos.

Medida	T_c estimada (L=100)	T_c estimada (L= ∞)	T_c teórico [10]
C_V	$2,27 \pm 0,01$	$2,26 \pm 0,01$ ou $2,28 \pm 0,01$	2,269
χ	$2,26 \pm 0,01$	$2,25 \pm 0,01$ ou $2,27 \pm 0,01$	2,269

Tabela 4.1: temperaturas críticas obtidas a partir de simulações. A estimativa para $L \rightarrow \infty$ possui dois valores para cada medida devido à equação 4.1

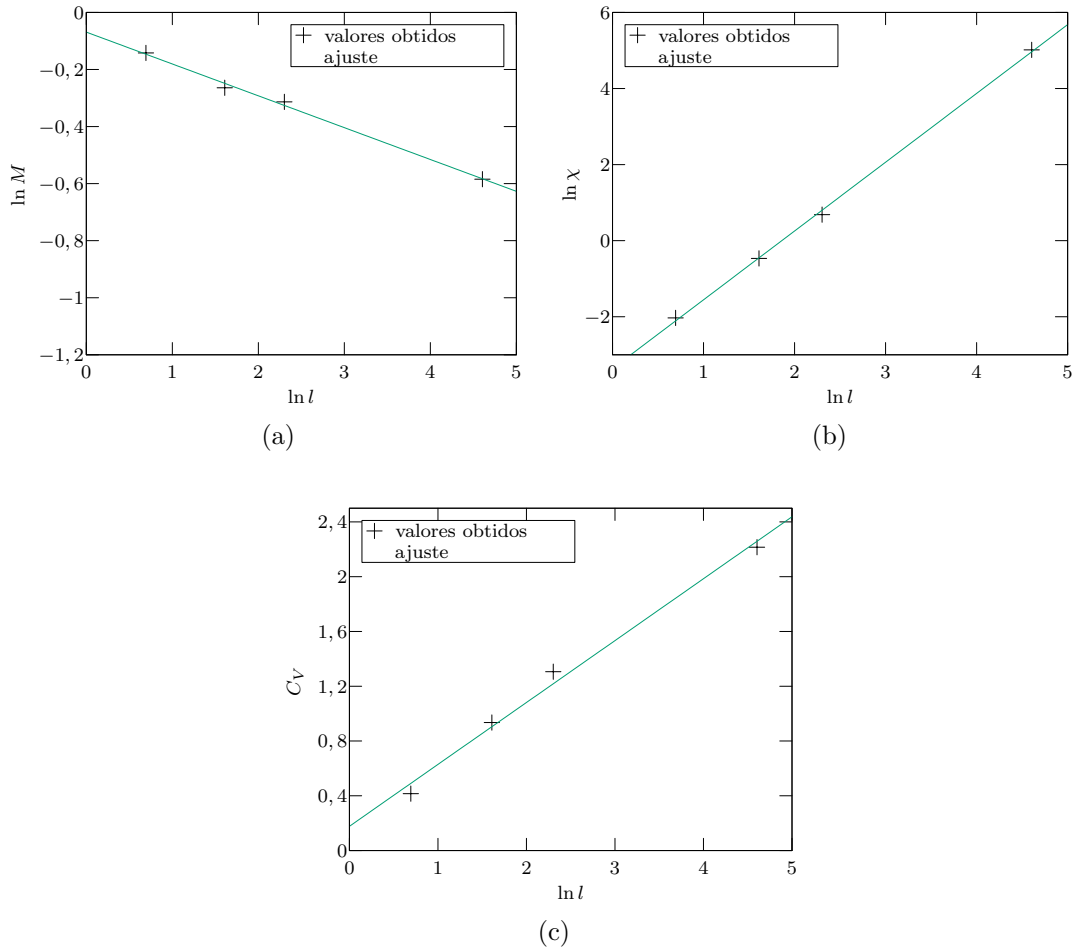


Figura 4.8: Gráficos utilizados para a obtenção dos expoentes críticos.

Partindo das equações (2.34), (2.35) e (2.36) pode-se perceber que para a obtenção dos expoentes críticos é necessário a confecção dos seguintes gráficos: $\ln M \times \ln L$, $\ln C_V \times \ln L$ e $\ln \chi \times \ln L$. Onde, ao se considerar $\nu = 1$ temos que a inclinação da reta será dada pelos

próprios expoentes críticos. Pelo que pode ser visto a partir da figura 4.3, a magnetização na rede 100×100 possui uma variação muito abrupta perto da temperatura crítica, trazendo uma imprecisão indesejada no cálculo do expoente crítico. Para contornar tal adversidade, nesta etapa do trabalho foram utilizados os dados obtidos no programa confeccionado para o cálculo da temperatura crítica.

Surge um problema ao se tentar confeccionar o gráfico $\ln C_V \times \ln L$ pois $\alpha = 0$ no modelo de Ising bidimensional, e assim sendo, torna-se mais interessante realizar o gráfico $C_V \times \ln L$ para a obtenção de c_0 . Isso pode ser realizado pois a capacidade térmica pode ser escrito como sendo $C_V = C_0 \ln L$. C_0 serve como base para se prever o comportamento da capacidade térmica perto da temperatura crítica em diferentes tamanhos de rede.

Os valores obtidos a partir do ajuste realizado no gráfico 4.8 pode ser visto na tabela 4.2.

Medida	Expoente	Valor Experimental	Valor Teórico [3] [11]
Magnetização	β	$0,112 \pm 0,005$	0,125
Sus. Magnética	γ	$1,808 \pm 0,037$	1,75
Capacidade térmica	c_0	$0,452 \pm 0,031$	0,5

Tabela 4.2: Valores obtidos para os expoentes críticos

Os valores encontrados para a temperatura crítica (T_c), para C_0 e para o expoente crítico γ estão todos dentro do erro experimental, porém, o valor do expoente crítico β possui um valor, mesmo sendo próximo, menor que o esperado.

Conclusões

Neste trabalho, foram realizados alguns cálculos relacionados ao ensemble canônico direcionado a solução do modelo de Ising, bem como a solução deste mesmo modelo em uma configuração unidimensional. A partir dos resultados obtidos com estes cálculos é que tornou-se possível a reprodução de um programa em C para a solução do modelo de Ising bidimensional em redes finitas, que já fora realizado em outros artigos. O programa rendeu vários dados que posteriormente foram analisados em forma de gráficos para obtenção dos expoentes críticos β e γ . Também foram encontrados o valor da temperatura crítica para uma rede infinita e o comportamento da capacidade termica em função do tamanho do sistema.

No decorrer do trabalho, foi possível perceber que deve-se prestar uma atenção considerável na coleta da medida da magnetização. Pôde ser visto, principalmente em redes menores, que ao se considerar apenas o valor médio absoluto da magnetização é possível obter uma magnetização nula, quando se deveria ser observado uma magnetização espontânea. Para solucionar tal problema, no lugar de se utilizar o valor médio absoluto da magnetização, é necessário a utilização do valor médio da magnetização absoluta.

Outro fator que se tornou visível no decorrer do trabalho está relacionado aos tamanhos de rede, bem como as variações de temperatura e a quantidade de passos de Monte Carlo que foram utilizados durante as simulações. Vale lembrar que quanto maior o tamanho da rede mais “próximo” os resultados chegam de uma rede infinita, porém o tempo de processamento será maior tanto pelo tanto de passos de Metrópolis, lembrando que em um passo de Metrópolis são realizados um número de sorteios aleatórios equivalente ao número de spins da rede, quanto pelo aumento de passos de Monte Carlo para que o resultado se torne confiável. Analogamente temos a variação de temperatura presente no algoritmo, onde, quanto menor ela for mais preciso será o cálculo da temperatura crítica, porém, mais temperaturas serão simuladas e maior será a quantidade de passos de Monte Carlo necessários para a obtenção de um resultado satisfatório. Sendo que no presente trabalho foi utilizado um processador “*Celeron(R) Dual-Core CPU T3500@2,10GHz × 2*”, para a confecção da rede 100×100 com a temperatura inicial $T_i = 2, 15$ e a temperatura final $T_f = 2, 45$, tendo uma variação de temperatura $\Delta T = 0.01$ foram necessários aproximadamente 8 horas de processamento.

Apêndice A

O Algoritmo

```
1  #include <stdio.h>
2  #include <math.h>
3  #include <gsl/gsl_rng.h>
4  #include <time.h>
5
6  #define Nx 2           //define o numero de colunas que o sistema apresentará.
7  #define Ny Nx         //define o número de linhas sendo igual ao número de colunas
8  #define Ti 1.0        //define a temperatura inicial do sistema.
9  #define dT 0.1        //define a variação de temperatura do sistema.
10 #define Tf 4.0        //define a temperatura final do sistema.
11 #define MCS 100000    //define a quantia de passos de monte carlo.
12
13 int main(int argc, char **argv){
14     int i, ju, jd, j, il,ir, k, k1;
15     int spin[Nx][Ny];
16     double M=0, M1, M2, E=0, E1, E2, dE, T, cp, xm;
17     const gsl_rng_type * t;
18     gsl_rng * r;
19     gsl_rng_env_setup();
20     r = gsl_rng_alloc (gsl_rng_ranlxs0);
21     gsl_rng_set (r,time(NULL));
22     T=Ti;
23     FILE *fp;
24     fp = fopen ("output", "w");
25     //Construção - Inicio
26     for (i=0; i<Nx; i++)
27         {for(j=0; j<Ny; j++)
28             {if (gsl_rng_uniform (r)<.5)
29                 {spin[i][j]=-1;} else {spin[i][j]=1;}
30                 //printf("%d ", spin[i][j]);
31             } //printf("\n");
32         }
33     //Construção - FIM
34     //Transiente - Inicio
35     for (k=0; k<1000*(Nx*Ny); k++){
```

```

36     i=abs(gsl_rng_uniform (r)*Nx);
37     j=abs(gsl_rng_uniform (r)*Ny);
38     ir=(i+1)%Nx;
39     il=(i+Nx-1)%Nx;
40     ju=(j+1)%Ny;
41     jd=(j-1+Ny)%Ny;
42     dE=2*(spin[i][j]*(spin[i][ju]+spin[i][jd]+spin[il][j]+spin[ir][j]));
43     if (gsl_rng_uniform (r)<(exp(-dE/T)))
44         spin[i][j]=-1;
45 }
46 //Transiente - Fim
47 //calculo energia e magnetização iniciais - inicio
48 for (i=0; i<Nx; i++){
49     for (j=0; j<Ny; j++){
50         ir=(i+1)%Nx;
51         ju=(j+1)%Ny;
52         E-= spin[i][j]*(spin[i][ju]+spin[ir][j]);
53         M+= spin[i][j];
54     }
55 }
56 //calculo energia e magnetização iniciais - fim
57 for (T=Ti; T<Tf; T+=dT){
58     E1=0; E2=0; M1=0; M2=0;
59     for (k1=0; k1<MCS; k1++){
60         for (k=0; k<(Nx*Ny); k++){
61             i=abs(gsl_rng_uniform (r)*Nx);
62             j=abs(gsl_rng_uniform (r)*Ny);
63             ir=(i+1)%Nx;
64             il=(i+Nx-1)%Nx;
65             ju=(j+1)%Ny;
66             jd=(j-1+Ny)%Ny;
67             dE= 2*(spin[i][j]*(spin[i][ju]+spin[i][jd]+spin[il][j]+spin[ir][j]));
68             if (gsl_rng_uniform (r)<(exp(-dE/T))){
69                 spin[i][j]*=-1;
70                 E+= dE;
71                 M+= 2*spin[i][j];
72             }
73             E1+= E; M1+= M; E2+= pow(E, 2); M2+= pow(M, 2);
74         }
75     }
76     E1/= MCS*(Nx*Ny); E2/= MCS*(Nx*Ny); M1/= MCS*(Nx*Ny); M2/= MCS*(Nx*Ny);
77     cp= (E2 - pow(E1,2))/(pow(T,2)); xm= (M2 - pow(M1, 2))/(T);
78     E1/= Nx*Ny; M1/= Nx*Ny; cp/= Nx*Ny; xm/= Nx*Ny;
79     fprintf (fp, " %e %e %e %e %e \n" , T, E1, fabs(M1), cp, xm);
80 }
81 fclose(fp);
82 gsl_rng_free (r);
83 return 0; }

```

Referências Bibliográficas

- [1] M. J. d. Oliveira, *Termodinamica*. Editora Livraria da Fisica, 2005.
- [2] R. Eisberg, R. e Resnick, *Fisica Quântica*. Editora Campus, 1979.
- [3] S. R. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*. Editora da Universidade de São Paulo, 2005.
- [4] E. Ising, *Beitrag zur theorie des ferro-und paramagnetismus*. PhD thesis, 1924.
- [5] J. Von Neumann, S. Ulam, and A. M. S. Bulletin, “Random ergodic theorems,” *Abstract*, vol. 51-9, p. 165, (1945).
- [6] H. Paganetti, H. Jiang, K. Parodi, R. Slopsma, and M. Engelsman, “Clinical implementation of full monte carlo dose calculation in proton beam therapy,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 53, no. 17, p. 4825, 2008.
- [7] G. Lu and A. E. Ades, “Combination of direct and indirect evidence in mixed treatment comparisons,” *Statist. Med.*, vol. 23, p. 3105–3124, 2004.
- [8] C. M. Rutter and C. A. Gatsonis, “A hierarchical regression approach to meta-analysis of diagnostic test accuracy evaluations,” *Statist. Med.*, vol. 20, p. 2865–2884, 2001.
- [9] M. Arellano and S. Bond, “Some tests of specification for panel data: Monte carlo evidence and an application to employment equations,” *The Review of Economic Studies*, vol. 58, no. 2, pp. pp. 277–297, 1991.
- [10] L. Onsanger, “Crystal statistic. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition,” *Physical Review*, vol. 65, Numbers 3 and 4, p. 117, 1944.
- [11] T. Kennedy, “Introduction to mathematical physics,” 2008.