

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
PRO-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA  
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

A MAGNETIZAÇÃO ESPONTÂNEA DO MODELO DE ISING NUMA REDE  
RETÂNGULAR

MANAUS  
2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
PRO-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA  
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL  
PIB-E/0006/2012  
A MAGNETIZAÇÃO ESPONTÂNEA DO MODELO DE ISING NUMA REDE  
RETÂNGULAR

Bolsista: Antonia Cristina campos paz, FAPEAM.

Orientador: Prof.º Dr.º Minos Martins Adão Neto.

MANAUS

2013

## RESUMO

Ao contrário das transições de fases tradicionais em sistemas clássicos que são governadas por flutuações térmicas enquanto que uma transição de fase quântica está relacionada à flutuações quânticas associadas ao princípio da incerteza de Heisenberg que pode ocorrer no estado fundamental ( $T=0$ ) quando algum parâmetro não-térmico alcança certo limiar crítico. Um bom exemplo de modelo com transição de fase quântica é o Ising com campo transversal, que foi proposto por de Gennes para descrever a transição de fase ordem-desordem em materiais ferroelétricos, onde para o valor crítico do campo transversal temos quebra espontânea de simetria. Tomaremos como um exemplo simples de transição de fase clássica o modelo de Ising Ferromagnético na ausência de um campo transversal para descrevermos qualitativamente o comportamento da magnetização como função da temperatura. Esse modelo pode ser objeto de estudos por uma variedade de métodos, em particular a teoria de campo efetivo correlacionado (EFT), que é baseada no uso da identidade de spin Ising e a técnica do operador diferencial de Honmura e Kaneyoshi (1974), tem mostrado ser eficiente obtendo valores da temperatura.

## SUMÁRIO

RESUMO .....	<a href="#">3</a>
INTRODUÇÃO .....	4
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
MÉTODOS UTILIZADOS.....	7
RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	9
CONCLUSÃO .....	12
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	13
CRONOGRAMA.....	14

## INTRODUÇÃO

Para o estudo da criticalidade e termodinâmica de sistemas quânticos foram desenvolvidas algumas técnicas, tais como: função de Green, aproximação de clusters (Oguchi, operador diferencial, equação integral), grupo de renormalização, expansão em séries e simulação de Monte Carlo. [1]

No entanto a dificuldade operacional nos problemas propostos tem mostrado que as técnicas são muito difíceis de serem utilizados, pois geralmente necessitam de grandes recursos computacionais. Tentando solucionar os mais variados sistemas complexos, tem-se formulado métodos aproximativos, que se mostra adequado quando comparados com resultados rigorosos em alguns casos limites do sistema.

Na obtenção da função de partição para sistemas de  $N$  partículas, por exemplo, de spin  $1/2$ , o funcional traço " $T_R$ " na função de partição representa matematicamente uma soma sobre  $2^N$  configurações de spins. Por exemplo, seja  $N=2$  e denotamos de spin para cima (+) e para baixo (-).

O estado quântico consiste na obtenção dos autovalores de  $H(1,2)$  escritos na base  $\varepsilon = \{(+ +), (+ -), (- +), (- -)\}$ . No intuito de eliminar as flutuações estatísticas ( $\sim N^{1/2}$ ), a mecânica estatística de equilíbrio analisa o sistema no chamado limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). Temos ainda que, para um sistema de partículas interagentes apresentarem uma transição de fase é necessário, estarmos no limite termodinâmico. [2]

O modelo de Ising descreve o comportamento da magnetização, susceptibilidade, energia interna e calor específico como funções da temperatura serão obtido através do hamiltoniano:

$$H = -J_1 \sum_{i+\delta_x} \sigma_i \sigma_{i+\delta_x} - J_2 \sum_{i+\delta_y} \sigma_i \sigma_{i+\delta_y} \quad (1)$$

Onde  $J_1$  e  $J_2$  são interações de troca entre os momentos magnéticos e  $\sigma_i = \pm 1$  e a soma é feita entre os pares dos primeiros vizinhos com o número de coordenação  $z$ .

## REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O modelo de Ising foi proposto inicialmente em 1920 por Wilhelm Lenz para o estudo de materiais magnéticos e foi resolvido inicialmente em uma dimensão pelo estudante Ernest Ising em 1925, tendo solução exata mais não apresentando transição de fase e magnetização espontânea [3].

Em 1936 Lars Onsager através da solução analítica provou que a magnetização espontânea pode acontecer no caso bidimensional e ainda em 1944 resolveu o modelo para duas dimensões na ausência de um campo magnético demonstrando a transição de fase [4].

O modelo é uma ferramenta poderosa pra o estudo de materiais magnéticos, esses materiais possuem seus spins distribuídos de maneira desordenada, de forma que o campo magnético do material é nulo. Mais existem alguns materiais com uma distribuição de momentos altamente alinhados, possuindo um campo magnético intenso. Temos os seguintes estados nos quais os materiais com traços magnéticos podem estar:

- I. Paramagnéticos: Possuem spins desemparelhados que na presença de um campo magnético os mesmo se alinham, provocando um leve aumento na intensidade do valor do campo magnético.
- II. 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.
- III. Ferromagnético: Os materiais ferromagnéticos têm pequenas regiões, os domínios magnéticos, nas quais, os momentos magnéticos atômicos permanentes estão alinhados. Quando o material está desmagnetizado, a direção do alinhamento num domínio é independente da direção em outro domínio, e então, não há campo magnético resultante no interior do material. Quando o material estiver magnetizado, os domínios do material ferromagnético ficam com os momentos alinhados e proporcionam contribuição muito forte ao campo magnético. Este alinhamento pode persistir mesmo quando o campo externo for removido, provocando o magnetismo permanente do material.

Com o passar dos anos o modelo de Ising ganhou força diante da análise de sistemas e modelagens com vista no comportamento de alguns elementos, buscando explicar o Ferromagnetismo, considerando interações de curto alcance entre os spins.

Esses são elementos individuais que modificam suas propriedades de acordo com o ambiente e com os elementos de sua vizinhança. Além do Ferromagnetismo também é capaz de descrever outros sistemas físicos, tais como fluidez do gás de rede e ligas binárias. Entretanto, neste trabalho consideramos o modelo de Ising apenas para o Ferromagnetismo, aonde os spins interagentes na rede bidimensional possuem apenas dois estados (+) e (-) a partir do modelo do Hamiltoniano de spin apresentado na introdução deste trabalho e com o auxílio da técnica do operador diferencial, proposta por Honmura e Kaneyoshi em 1997 [5] num primeiro tratamento em aglomerados, denominado de cluster com um único spin. Essa teoria apresenta resultados bastante satisfatórios para com as grandezas termodinâmicas do modelo de Ising em relação aos cálculos de campo médio usuais em aglomerados finitos do mesmo tamanho. Iremos fazer a modelagem gráfica com fins de obtermos os valores e propriedades termodinâmicas como magnetização, susceptibilidade, energia interna e calor específico do modelo de Ising ferromagnético numa rede retangular [6].

## MÉTODOS UTILIZADOS

O modelo de Ising. Por sua formulação simples e solução exata em redes bidimensionais é frequentemente referenciado ao se construir novas técnicas de cálculo, analíticos ou numéricos.

Para tais cálculos foram considerados as propriedades termodinâmicas envolvidas no sistema, tais como, magnetização, susceptibilidade, energia interna e calor específico, tais resultados foram obtidos através do auxílio de novas técnicas e de recursos computacionais, como: Função de Green: função utilizada para resolver equações diferenciais não homogêneas sujeitas a condições iniciais ou condições de contorno determinadas, aproximação de Cluster (Oguchi, operador diferencial, equação diferencial), expansão em série e simulação de Monte Carlo e matriz de transferência. Para desenvolver resultados experimentais, foi utilizada a teoria de campo efetivo baseada na técnica do operador diferencial, que foi proposta anos atrás por Honmura e Kaneyoshi [7], cuja potencialidade em uma versão mais simples fornece resultados melhores que a aproximação de campo médio.

Primeiramente, foi desenvolvida formalmente a teoria de campo efetivo em aglomerados de tamanhos finitos (clusters) para sistemas interagentes de spins descritos por um Hamiltoniano geral  $H$ . Em seguida, para fixar as ideias, foram aplicados os conceitos aqui desenvolvidos ao modelo de Ising. O ponto de partida veio da mecânica estatística de equilíbrio, sendo o valor médio de uma grandeza  $A$  definida por:

$$\langle A \rangle = \text{Tr} A e^{-\beta H} \quad (2)$$

A função de partição foi:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (3)$$

No qual  $\text{Tr}$  é o funcional traço no espaço de todos os spins. Sendo  $H$  um Hamiltoniano que descreve um sistema qualquer com  $N$  partículas interagentes, foram separados em duas partes, ou seja:

$$H = H_{\xi} + H'_{\xi} \quad (4)$$

Onde  $H_{\xi}$  representa o Hamiltoniano de um aglomerado ( $\xi$ ) finito com  $n < N$  spins levando em conta as interações dentro do aglomerado e com a sua vizinhança e  $H'_{\xi}$  representa a parte restante ( $\xi_0$ ) que não possui spins do aglomerado  $\xi$ .



$\varepsilon \Rightarrow$  Aglomerado finito  $n < iV$

$\varepsilon' \Rightarrow$  Outra parte do aglomerado  $N - n$

Observação importante  $[H_\varepsilon, H_{\varepsilon'}] = 0$ , assim é dada o valor médio da grandeza  $(\varepsilon)$ :

$$\langle O(\varepsilon) \rangle = \langle \frac{Tr_\varepsilon \{ O(\varepsilon) e^{-\beta H_\varepsilon} \}}{Tr_\varepsilon} \rangle \quad (5)$$

A Magnetização para um único aglomerado foi:

$$m_{1A} = \langle \sigma_{1A} \rangle = \langle \frac{Tr \sigma_{1A} e^{-\beta \hat{H}_1^A}}{Tr e^{-\beta \hat{H}_1^A}} \rangle \quad (6)$$

$$\hat{H}_{1A}^A = -J_x \sigma_{1Ax} \sum_{\vec{J}_x} \sigma_i + \vec{J}_x + J_y \sigma_{1By} \sum_{\vec{J}_y} \sigma_i + \vec{J}_y + H \sigma_{1A} \quad (7)$$

(8)

$$m_{1A} \equiv m_A$$

$$m_A = \langle \frac{Tr \sigma_{AX} e^{K_x \sigma_{Ax} - K_y \sigma_{By} + L \sigma_{AX}}}{Tr e^{K_x \sigma_{Ax} - K_y \sigma_{By} + L \sigma_{AX}}} \rangle \quad (9)$$

No qual somando-se o traço sobre todo o aglomerado tem-se a magnetização por spin dada por:

$$m_A = \langle \tan h (K_x - K_y + L) \rangle \quad (10)$$

$$m_A = \langle \tan h (a) \rangle \quad (11)$$

A partir do desenvolvimento da técnica do operador diferencial nos é permitido fazer o uso da linguagem de programação FORTRAN, no procedimento de cálculos numéricos para obtenção de gráficos do comportamento qualitativo do mesmo, ou seja, gráficos da relação entre a magnetização e a temperatura, essa linguagem é utilizada, pois permite a criação de programas que primam pela velocidade de execução e resultados precisos.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Na teoria microscópica da transição ferromagnética, torna-se então interessante considerar um modelo muito simples incorporando interações de curto alcance em uma rede d-dimensional, o modelo de Ising:

A solução exata em uma dimensão com (d=1) foi escrita na forma:

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (12)$$

A função canônica de partição é dada por:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[ K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (13)$$

Onde  $K = \beta J, L = \beta H$  e o segundo termo foi escrito de maneira mais simétrica. Por mera conveniência, vamos adotar as condições Periódicas de contorno,  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ . Agora é interessante escrevermos a função de partição na forma.

$$Z_N = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \prod_{i=1}^N T(\sigma_i, \sigma_{i+1}), \quad (14)$$

e,

$$T = (\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp \left[ K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{L}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (15)$$

Essa última expressão pode também ser escrita como uma matriz 2X2, indexada pelos valores das variáveis de spin  $\sigma_i = \pm 1$  e  $\sigma_{i+1} = \pm 1$ . Vamos então definir a Matriz de transferência:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T(+, +) & T(+, -) \\ T(-, +) & T(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(K+L) & \exp(-K) \\ \exp(-K) & \exp(K-L) \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Utilizando esse formalismo matricial, é fácil perceber que a equação (3) para a função canônica pode ser interpretada como traço do produto de N matriz de transferências idênticas,

$$Z_N = \text{Tr} (\mathbf{T})^N \quad (17)$$

Além disso, por construção, a matriz de transferência (6) é simétrica e, portanto, diagonalizável por meio de uma transformação unitária,

$$\mathbf{UTU}^{-1} = \mathbf{D} \text{ com } \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^+ \quad (18)$$

onde  $\mathbf{D}$  é a matriz diagonal. Portanto, a função canônica de partição canônica pode ser escrita em termos dos autovalores da matriz de transferência.

$$Z_N = \text{Tr}(\mathbf{U}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{U})^N = \text{Tr}(\mathbf{D})^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \quad (19)$$

onde:

$$\lambda_{1,2} = e^K \cosh L \pm [e^{2K} \cosh^2 L - 2\sinh(2K)]^{1/2} \quad (20)$$

São dados pelas raízes da equação secular,  $T - \lambda l = 0$ . É fácil perceber que esses autovalores são sempre positivos e que  $\lambda_1 > \lambda_2$  ( exceto no ponto trivial  $T=H=0$ ). A campos nulo essas expressões ficam mais simples,

$$\lambda_1 = 2 \cosh K \geq \lambda_2 = 2\sinh K, \quad (21)$$

Com a degenerescência ( $\lambda_1 = \lambda_2$ ) no limite  $K \rightarrow \infty$  (ou seja,  $T \rightarrow 0$ ).

Através desta técnica podemos obter os valores para a Magnetização:

$$m = \frac{l^K \sinh L}{\sqrt{l^{2K} \sinh^2 L + e^{-2K}}} \quad (22)$$

Susceptibilidade a campo nulo:

$$\chi_0 = \left( \frac{\partial m}{\partial h} \right) = \frac{1}{KbT} l^{2j/KbT} \quad (23)$$

MAGNETIZAÇÃO:

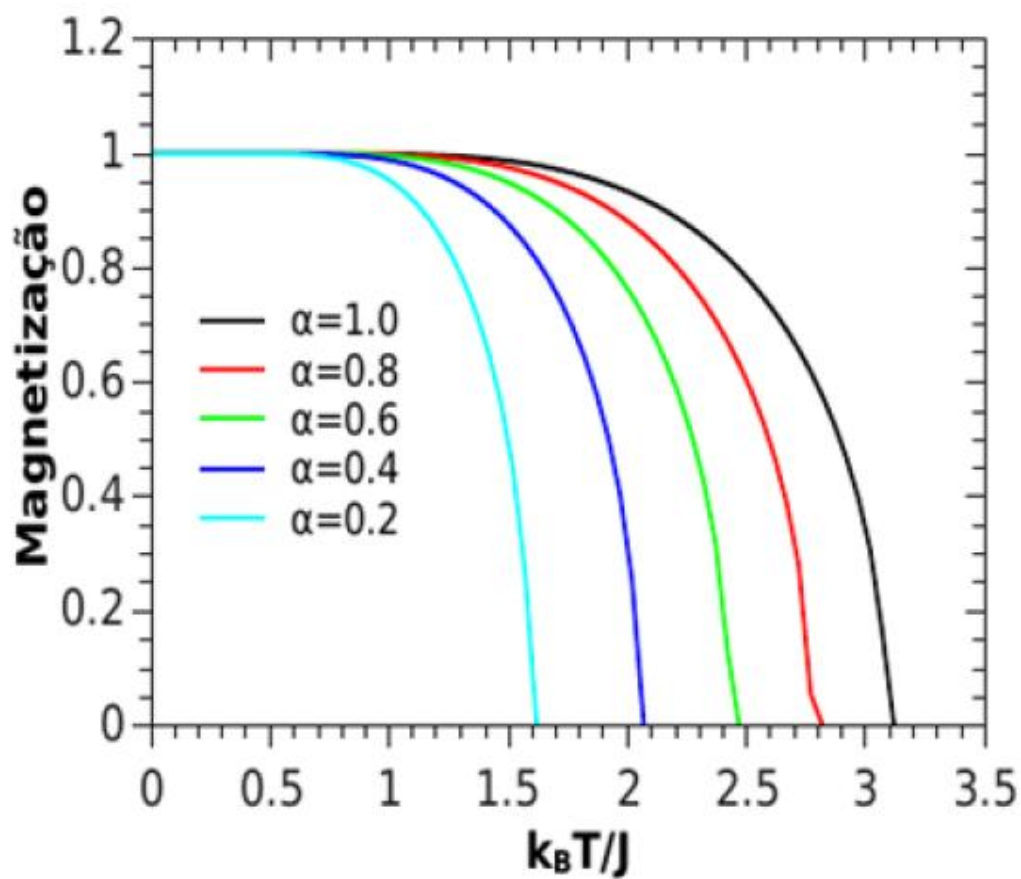
$$M = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \delta_i \right\rangle \quad (24)$$

A soma do traço sobre os aglomerados nos fornece a magnetização por spin.

$$m_A = \langle \tan h(a) \rangle$$

(25)

Fig.1: Comportamento magnetização espontânea com função da temperatura usando a técnica do operador diferencial do Hamiltoniano descrito na (eq.1)



## CONCLUSÃO

O modelo de Ising utilizado neste projeto teve como principal objetivo estudar o comportamento de materiais magnéticos, tais matérias como mostrado no desenvolvimento, possuem spins que na presença de campo magnético externo **B** mudam seu comportamento de origem, dentre estes como principal foco de pesquisa foi analisado os materiais ferromagnéticos, pois estes com a presença ou ausência do campo magnético externo **B**, possuem seus spins fortemente alinhados, nos permitindo predizer propriedades termodinâmicas como susceptibilidade magnética, magnetização espontânea, energia interna e calor específico.

Com o intuito de ligar o mundo microscópico da mecânica estatística ao mundo macroscópico da termodinâmica, algumas técnicas foram utilizadas, tais como matriz de transferência e a técnica do operador diferencial. Aplicadas ao modelo de Ising ferromagnético utilizando a função de partição, que se mostra como ponto de partida para o desenvolvimento da resolução analítica do hamiltoniano de spin.

Após o auxílio das técnicas do operador diferencial, foi possível pensar em uma solução sobre o comportamento da magnetização espontânea com função de temperatura com o auxílio da ferramenta computacional FORTRAN.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] C. H. CHANG University of Washington, Seattle, Washington (Received September 17, 1952).

[2] C.N.Yang and T.D. Lee, Phys. Rev. **87**, 404 (1952).

[3] E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).

[4] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).

[5] R. Honmura and T. Kaneyoshi, J. Phys. C **12**, 3979 (1979).

[6] C. H. Chang, Phys. Rev. **88**, 1422 (1952).

[7] R. Honmura and T. Kaneyoshi, Prog. Theor. Phys. (Kyoto) **60**, 635 (1978).

## CRONOGRAMA

### Cronograma de Atividades

Nº	Descrição	Ago 2012	Set	Out	Nov	Dez	Jan 2013	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul
1	Levantamento bibliográfico	X	X										
2	Estudo do Modelo de Ising		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	
3	Método da Matriz de Transferência			X	X	X	X	X	X				
4	Estudo da Técnica do Operador Diferencial					X	X	X	X	X	X	X	
5	Aplicação da Técnica do Operador Diferencial no Modelo de Ising Bidimensional						X	X	X	X	X		
6	Elaboração do Resumo e Relatório Final (atividade obrigatória)											X	
7	Preparação da Apresentação Final para o Congresso (atividade obrigatória)												X

