ESTUDO DO MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS UTILIZANDO TÉCNICA DE SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO – UFMT

INSTITUTO DE FÍSICA – IF

ESTUDO DO MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS UTILIZANDO TÉCNICA DE SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO.

Bolsista: Diego Castanon Galeano

Orientador: Prof. Dr. Paulo Henrique Lana Martins (Inst. Física/UFMT)

Cuiabá – MT, 2009

SUMÁRIO

RESUMO

Podemos estudar fenômenos magnéticos a partir do modelo de Ising, que considera momentos magnéticos (spins) localizados, distribuídos em uma rede. No caso mais simples, consideramos que cada spin interage apenas com os seus primeiros vizinhos. Interações entre segundos vizinhos podem ser incluídas no modelo, possibilitando o aparecimento de interações competitivas, dependendo de alguns parâmetros físicos. O modelo de Ising pode ser estudado de diferentes maneiras, entre elas a técnica de Monte Carlo e a aproximação de Campo médio. Neste trabalho estudamos o modelo de Ising utilizando simulações de Monte Carlo. A aplicação desta técnica não se restringe somente à física. Inúmeros problemas nas áreas de matemática, química, biologia, dentre outras, podem ser tratados por meio de simulações. Basicamente, a técnica de Monte Carlo consiste em obter uma seqüência de configurações do sistema de uma maneira estocástica, que depende de números aleatórios gerados durante a simulação. Em sistemas infinitos ou muito grandes, não podemos gerar todas as possíveis configurações, portanto, utilizamos uma amostragem dessas configurações. Neste trabalho, simulamos o modelo de Ising em uma rede quadrada, utilizando a amostragem por importância (*importance sampling*). Grandezas físicas importantes como magnetização, energia, calor específico e susceptibilidade magnética foram calculadas a fim de obter a temperatura crítica para este modelo.

Palavra Chave: Modelo de Ising e Monte Carlo

1.INTRODUÇÃO

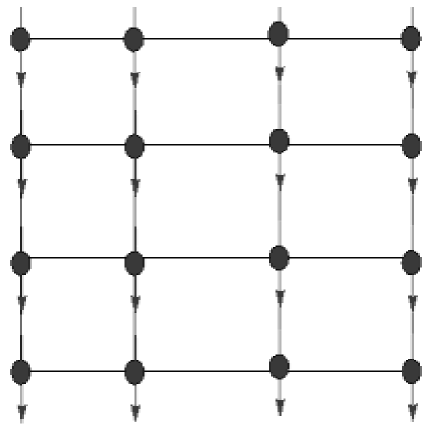
E indispensável falar do modelo de Ising quando se fala em estudar o magnetismo. Tal modelo teve uma importância histórica muito grande devido a sua aplicação para descrever o ferromagnetismo. O modelo foi proposto em 1920 por Welhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising.

O modelo de Ising considera momentos magnéticos (spins) localizados e distribuídos em uma rede no qual cada spin, em seu modelo mais simples, interage com seus primeiros visinhos na forma $-JS_i\,(S_{i+1} + S_{i-1})$, onde S_i assume os valores de -1 ou +1. Interações com seus segundos visinhos podem ser adicionados ao modelo o que possibilita o aparecimento de interações competitivas, dependendo de alguns parâmetros físicos, onde S_i assumes valores de -1, 0 e +1. Esse modelo nos possibilita estudar varias grandezas físicas importantes como a magnetização, calor especifico, suscetibilidade magnética e através disso determinar a temperatura critica do sistema, ou seja, a temperatura a qual acima dela não se vê magnetização e abaixo dela já aparece magnetização.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1. Modelo de Ising:

O do modelo de Ising é definido em uma rede bidimensional com um momento magnético, que aqui chamaremos de spin, e cada ponto da malha dessa rede, como na figura abaixo:



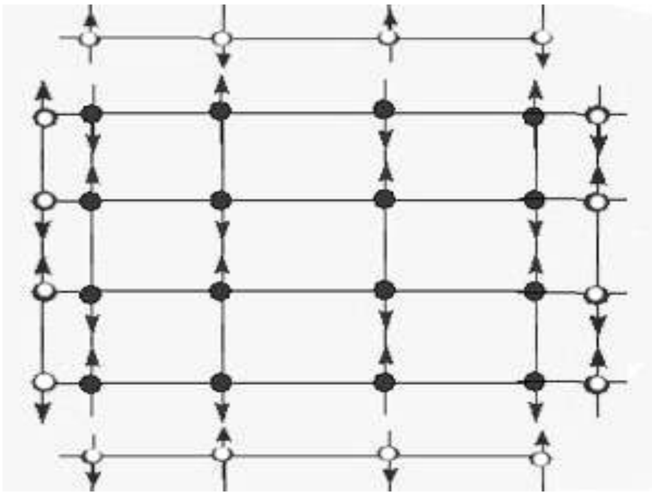
No caso mais simples, cada spin interage com seus primeiros vizinhos. Neste contexto, na ausência de um campo magnético externo, a energia total do sistema é:

$$E = -J \sum_{<i,j>}^{N} S_i S_j$$

Onde S_i assume o valor de -1 caso o spin esteja apontado para baixo ou +1 se estiver apontado para cima. A constante J representa uma constante de acoplamento e o somatório é realizado sobre os spins primeiros vizinhos.

Considerando que a interação do spin com seus primeiros vizinhos, o papel desempenhado pelos termos da expressão obtida é facilmente compreendido. Podemos observar que para J>0, o estado de mínima energia é obtido quando todos os spins estão paralelos (todos eles sendo +1 ou todos -1). No caso de J<0, a energia será mínima quando os spins estiverem antiparalelos (os spins alternados entre -1 e +1).

Neste trabalho utilizaremos uma rede quadrada. Como estamos interessandos em obter o comportamento de um sistema infinito é necessária uma situação de contorno porque os spins dos extremos da rede também necessitam interagir com seus primeiros vizinhos. Então pela condição periódica de contorno, colocamos uma copiada do sistema adjacente a cada extremidade, como na figura abaixo:



Os sítios representados pelo circulo vazio são a copia do extremo oposto e os cheios, os spins da matriz principal. A interação dos spins nos extremos da rede com os spins dos extremos do lado oposto é a condição de contorno do sistema.

3.2. Modelo de Ising com interação Competitiva:

Alem das interações de primeiros visinhos, podemos incluir visinhos mais distantes. Como por exemplo, considerando os segundos visinhos, a energia será dada por:

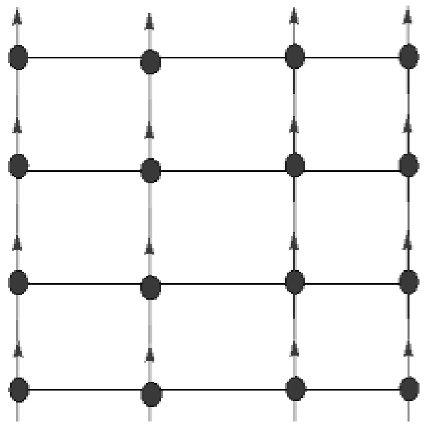
$$E = -J_1 \sum_{<i,j>}^{N} S_i S_j - J_2 \sum_{<i,k>}^{N} S_i \, S_k$$

Neste caso o primeiro termo compete com o segundo para determinar um sistema de menor energia.

2.1.1. Ferromagnetismo:

Um material é chamado ferromagnético quando há uma magnetização espontânea abaixo de uma temperatura critica, isto é, mesmo na ausência de um campo magnético externo observa-se um campo magnético proveniente daquele material.

Os spins dos átomos que formam o material têm uma forte tendência de se alinha uns com os outros dando origem a um momento magnético espontâneo. Essa situação pode ser ilustrada em uma rede bidimensional como está abaixo:



Essa orientação ordenada espontânea dos spins tende a desaparecer à medida que o sistema é aquecido, ou seja, tende a aparecer uma desordem entre os momentos magnéticos dos spins e a magnetização desaparece, é o que chamamos de Temperatura Critica T_c ou *Temperatura de Curie*.

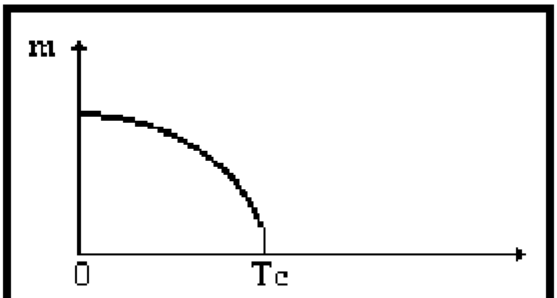
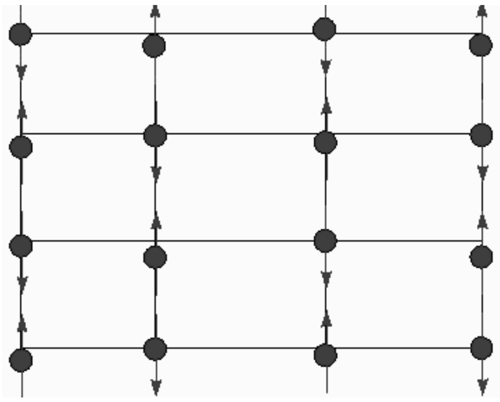


Fig. 1

2.1.2. Antiferromagnetismo:

Ao passo que o ferromagnetismo possui uma magnetização espontânea devido ao alinhamento, ou paralelismo dos spins, o antiferromagnetismo é a ausência de um campo espontâneo do material, isso porque os spins estão alinhados antiparalelamente.



Analogamente aos materiais ferromagnéticos, a tendência ao alinhamento dos spins de um material antiferromagnético desaparece próxima a temperatura crítica.

2.2. Tecnica de Monte Carlo:

Com o progresso alcançado com o advento dos computadores e a constante evolução do mesmo, o calculo numérico passou a ser uma ferramenta muito importante para o desenvolvimento das ciências.

Pode-se dizer que hoje a física se divide em três vertentes, a teórica, a experimental e a simulação. Hoje, ainda não se sabe a solução exata do modelo de Ising em três dimensões, mas através da simulação numérica podemos saber todas suas características, alem de poder alterar parâmetros quando for conveniente.

Dentre os métodos numéricos, a técnica de Monde Carlo tem destaque em toda a área da física, matemática e biologia. Um marco histórico dessa técnica foi o trabalho desenvolvido por Metropolis em 1953 (METROPOLIS *et al.*, 1953), para aplicação em modelos magnéticos

A técnica de Monte Carlo consiste em obter uma seqüência de configurações do sistema de uma maneira estocástica, que depende de números aleatórios gerados durante a simulação.

Para uma quantidade Q, magnetização ou energia, por exemplo, o seu valor médio é definido por:

$$\bar{Q} = \frac{\sum_i^M Q(c_i)e^{-\beta E(c_i)}}{\sum_i^M e^{-\beta E(c_i)}}$$

sendo $E(c_i)$ a energia da enésima configuração. Como é praticamente impossível que todas as configurações sejam somadas em um sistema com muitos graus de liberdade, então soma-se as M configurações mais importantes numa dada temperatura. Suponhamos que essas configurações mais importantes sejam escolhidas com uma certa probabilidade. Então $\bar{Q}$ passa a ser:

$$\bar{Q} = \frac{\sum_i^M Q(c_i)e^{-\beta E(c_i)}/P(c_i)}{\sum_i^M e^{-\beta E(c_i)}/P(c_i)}$$

Uma escolha para P(c_i) é $P(c_i) = e^{-\beta E(c_i)}/Z$, com $Z = \sum_i^M e^{-\beta E(c_i)}$, o que implica em:

$$\bar{Q} = \frac{1}{M}\sum_i^M Q(c_i)$$

Esta escolha de $P(c_i)$ foi a contribuição Metropolis. Sua idéia foi construir uma seqüência de configurações c_1, c_2, ..., c_k, c_{k+1}, ..., c_m em que $_{ck+1}$ fosse construída a partir de c_k através de uma probabilidade de transição W($c_k \rightarrow c_{k+1}$) previamente definida. Para M muito grande seria possível escolher um W tal que uma configuração c_i gerada no processo tenha probabilidade $P(c_i) = e^{-\beta E(c_i)}/Z$.

No modelo de Ising com técnica de Monte Carlo, começa-se com uma rede de spins $S_i = \pm 1$ dispostos aleatoriamente. Escolhe-se um spin e faz a mudança $S_i \rightarrow -S_i$. Se a diferença de energia entra a configuração após a mudança e antes dela $\Delta E = E(-S_i) - E(S_i)$, for negativa aceitamos essa mudança em S_i. Se $\Delta E > 0$, aceitamos a nova configuração com a probabilidade $e^{\frac{\Delta E}{kT}}$. Na simulação isso é feito sorteando um numero aleatório r no intervalo de $0 \leq r \leq 1$ e se $e^{\frac{\Delta E}{kT}} > r$ também aceitamos a mudança. Só rejeitamos se $e^{\frac{\Delta E}{kT}} < r$. Ao variarmos a rede completa uma vez, temos um passo de monte carolo (MCS). Então devemos repetir esse procedimento inúmeras vezes para obter boas médias. É percorrida toda a rede fazendo essa mudança, após terminado, pega-se a configuração final de spins para calcular a média termodinâmica de acordo com a equação:

$$\bar{Q} = \frac{1}{M}\sum_i^M Q(c_i).$$

2.3. Calor Especifico:

O calor especifico c é uma grandeza física que indica a variação térmica de um corpo ao receber determinada quantidade de calor. O calculo do calor especifico pode ser em função da quantidade de calor Q, da massa m e da variação da temperatura ΔT

$$c = \frac{Q}{m\Delta T}$$

Nas simulações, uma maneira conveniente de avaliar essa grandeza é através da relação:

$$c = [< E^2 > -(< E >< E >)] \frac{L^2}{T^2}$$

Em uma transição (que chamamos de segunda ordem) á uma divergência no calor especifico. Assim, a partir do gráfico de c x *T*, podemos encontrar T_C observando o pico do calor especifico para diferentes tamanhos de redes.

2.4. Suscetibilidade Magnética

A suscetibilidade magnética x é uma das grandezas física mais importantes quando falamos em estudar propriedades magnéticas. É ela quem diz como o sistema reage em função da variação da magnetização. Sua determinação pode determinar a existencia de transição de fase, a existencia de estados com ordenamento magnético e a temperatura critica $T_{c.}$ E pode ser calculado da seguinte forma

$$x = [< B^2 > -(< B >< B >)] \frac{L^2}{T}$$

Onde B é a magnetização.

2.5. Cumulante de Binder ou Cumulante de Quarta Ordem

O cumulante de quarta ordem, também conhecido como cumulante de Binder, é muito importante para conhecer, ou determinar, a temperatura critica de um sistema magnético. Uma parcela do cumulante U_L versus a temperatura T para varios tamanhos de rede L possui um ponto de intesecção comum dessas curvas, e nesse ponto se observa o Tc do sistema. O cumulante de Binder é calculado da seguinte forma:

$$U_L = 1 - \frac{<s^4>L}{3<s^2>^2L}$$

onde s é a magnetização do sistema.

3. METODOLOGIA

O estudo foi iniciado com pesquisas bibliográficas sobre introdução a computação, modelo de Ising e técnica de Monte Carlo. Posteriormente foram ministradas algumas aulas sobre magnetismo e modelo de Ising, XY e Heisenberg com o professor Alberto Arruda, e introdução a computação com o professor Paulo Henrique Lana Martins.

A linguagem de programação utilizada nessa pesquisa foi a C. Foram feitos alguns programas para a aprendizagem desta linguagem e introduzirmos o modelo de Monte Carlo em alguns programas simples, como descobrir o valor de PI.

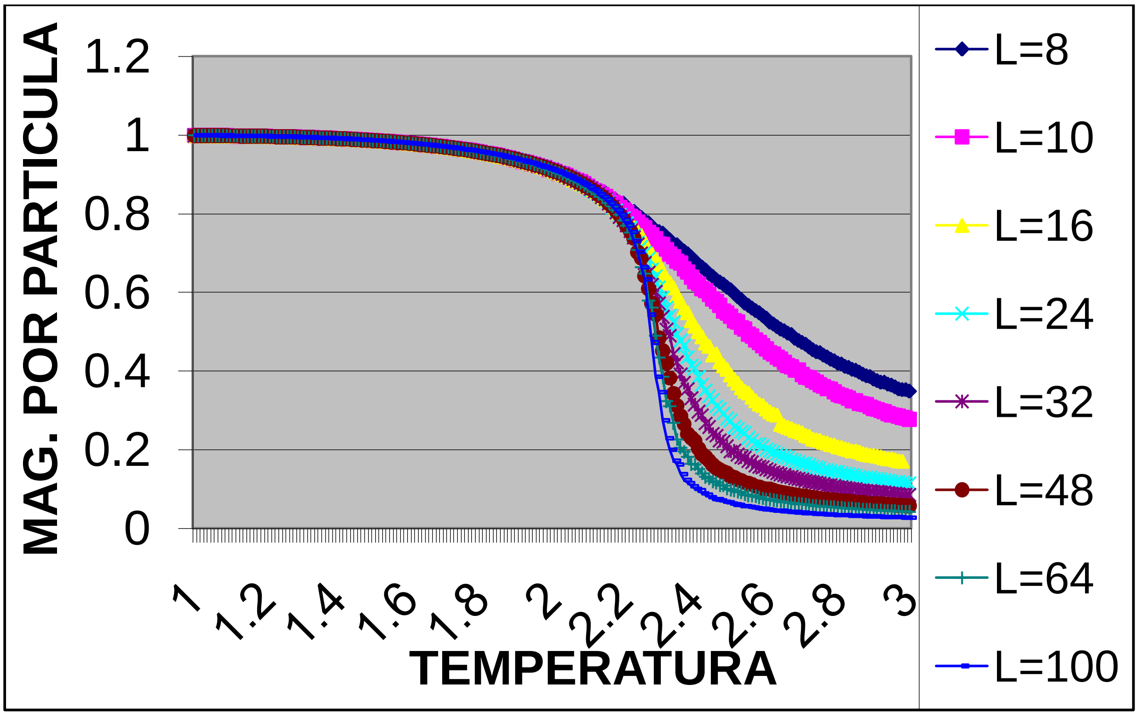
Após os estudos iniciais, fizemos a simulação do modelo de Ising através da técnica de Monte Carlo. O programa tem a seguinte organização:

1- Montamos uma matriz randonica de tamanho LxL;
2- Definimos os vizinhos e a condição de contorno;
3- Calculamos a magnetização e a energia da rede inicial;
4- Montamos uma nova matriz e fizemos a mudança do spin de $S_i \rightarrow -S_i$ (flip);
5- Calculamos a variação da energia ΔE, se ΔE for negativo aceitamos essa configuração, se não utilizamos a probabilidade $e^{\frac{\Delta E}{kT}}$.
6- Calculamos a magnetização, energia, calor especifico, suscetibilidade magnética e o cumulante de Binder da matriz final.
7- Os passos 4,5 e 6 foram feitos para temperaturas entre 1,0 e 3,0, variando 0,01.
8- Dos passos 4 ao 7 foram feitos 100 mil vezes (passos de Monte Carlo) e calculado a média das grandezas físicas descritas no passo 6. Os 10 mil primeiros foram desprezados por fazerem parte do tempo de relaxação.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

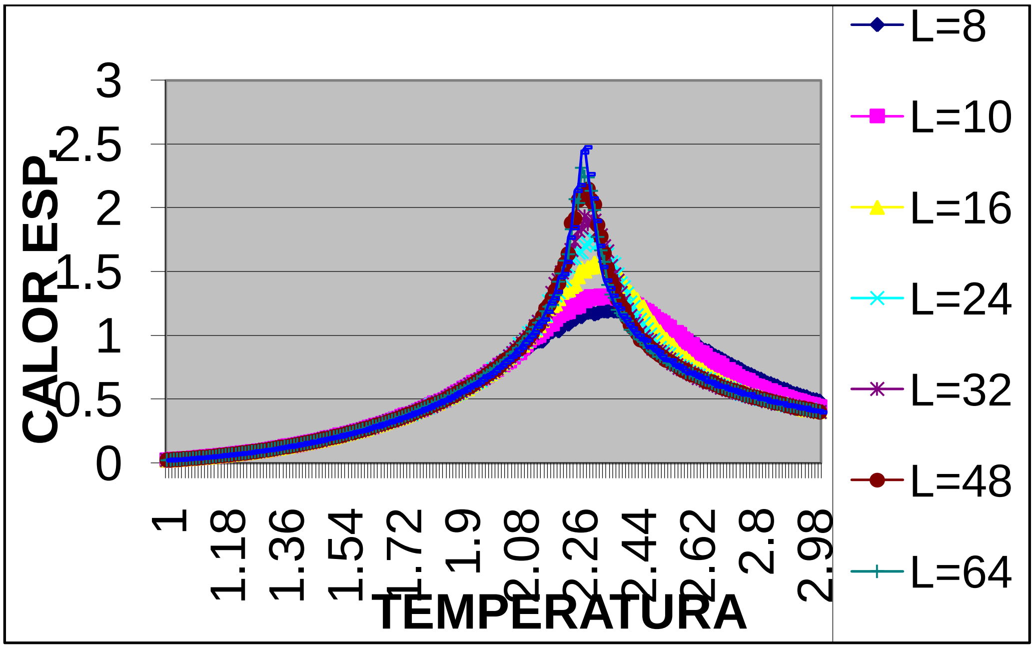
Com os resultados das grandezas físicas desejada em mãos, montamos os respectivos gráficos em função da Temperatura T_c a fim de determinar a temperatura critica:

-Magnetização



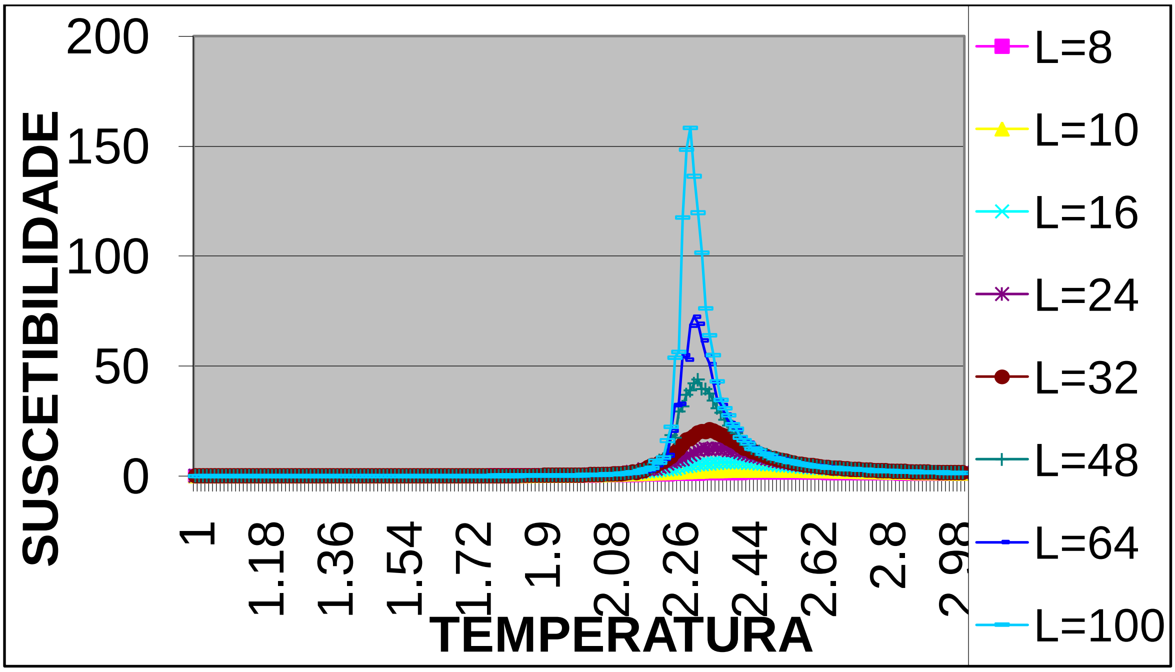
Neste gráfico observa-se que próximo a T_c a tangente a curva tende a uma reta vertical.

- Calor especifico



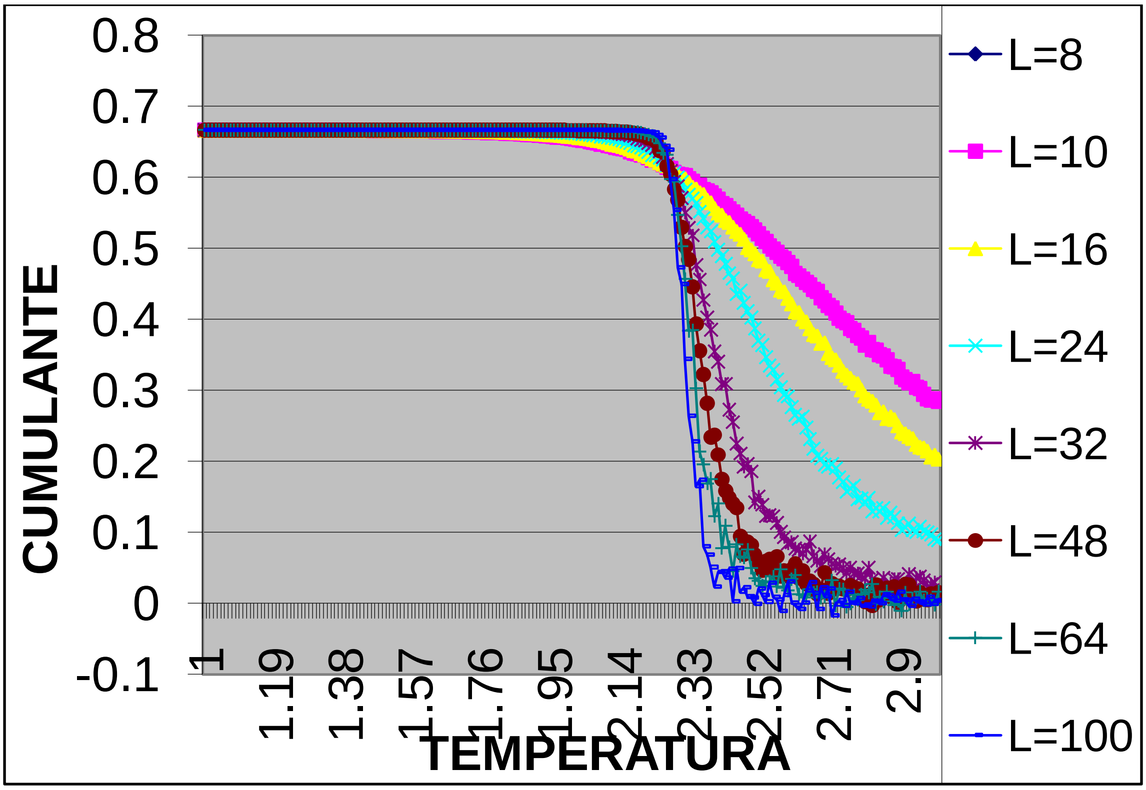
Neste gráfico, observa-se que o pico do calor especifico ocorre para T próximo de 2.3.

- Suscetibilidade Magnética



Vemos que o pico da suscetibilidade também esta em torno T = 2.3.

- Cumulante de Binder



Observa-se neste gráfico que o ponto de cruzamento entre as linhas dos gráficos dos diferentes tamanhos de rede L é o local do T_c. A estimativa de T_c por este gráfico também se aproxima de 2.3.

Estudando os gráficos gerados através dos resultados da nossa simulação, obtemos o valor de 2.3 para a temperatura critica T_c. Valores mais precisos podem ser obtidos a partir de simulações mais longas (maior número de passos de Monte Carlo) e/ou redes maiores. Os resultados obtidos pra a temperatura critica concordam com seu valor da solução exata de Onsager (T_c = 2.269) (ONSAGER, 1944).

A partir de uma temperatura critica não se vê mais magnetização em um sistema magnético, e essa pode ser obtida através de diferentes procedimentos, utilizando grandezas como a suscetibilidade magnética, calor especifico, cumulante de Binder e a própria magnetização, todas elas em função da temperatura, como foi citado na revisão de literatura e calculado por nossa simulação.

5. CONCLUSÃO

Com esse trabalho concluímos que o modelo de Ising é um modelo muito simples e aproximado de um sistema mais complexo, porém isso não o torna trivial por ter o mérito de ter uma solução exata, o qual nos permite estudar muito sobre o magnetismo.

O objetivo desse trabalho não foi desenvolver ou estudar cálculos exaustivamente, e sim utilizar da simulação computacional para estudar e observar fenômenos magnéticos em função da variação da temperatura que um sistema possa sofrer. Podemos ver que a magnetização só é possível entre o zero absoluto até uma determinada temperatura critica.

6. ATIVIDADES DESENVOLVIDAS

Pesquisas bibliográficas; Introdução a programação de computadores (em liguagem C); Estudo do modelo de Ising e da simulação de Monte Carlo com o professor Alberto Arruda e o nosso orientador Paulo Henrique Lana Martins; Análise dos resultados e elaboração do resumo para inscrição para o seminário de Iniciação Cientifica; Analise dos resultados e elaboração do relatório final.

7. REFERENCIAS BIBLIOGRAFIA

BINDER, K., D. W. HERMANN. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. Third Edition. Mainz June 1997

FARIA, C. C., A. J. A. de Oliveira, W. A. Ortiz. Estudo de Materiais pela técnica de Suscetibilidade Magnética AC. Artigo. Departamento de Física – UFSCAR. São Carlos – SP. Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 22, no.3, Setembro, 200

FIGUEIREDO, W. Magnetização dos materiais ferromagnéticos. Artigo. Departamento de Física_UFSC. Florianópolis-SP .Cad. Cat. Ens. Fis., Florianópolis, 4(2): 91-97, ago. 1987.

KERNIGHAN, B. W., D. M. RITCHIE. C, A Linguagem de programação Padrão ANSI. Editora CAMPUS. 22ª Tiragem.

LÍBERO, V. L. De Ising a Metropolis. Artigo. Departamento de Física e Informática – USP. São Carlos –SP. Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 22, no.3, Setembro, 200

MARTINS, P. H. L. Simulações de Monte Carlo em Problemas de Física Estatística. Fevereiro de 2004. UFMG.

METROPOLIS, N. ROSENBLUTH, A. W., ROSENBLUTH, M. N., TELLER, A. H., and TELLER, E. J. Chem. Phys. 21, 1087. 1953.

ONSAGER, L. Phys. Rev. 65, 117. 1944.