

REVISÃO TEÓRICO-COMPUTACIONAL DO MODELO DE ISING E SUA ENERGIA LIVRE

CAROLINA GARCIA CARDOSO¹; PROF. DR. CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR²;

¹Universidade Federal de Pelotas (UFPEL) – Carol52200211@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas (UFPEL) – carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

A área da matéria condensada tem como objeto de estudo as propriedades dos materiais, em que a termodinâmica pode ser aplicada para compreensão de diversas propriedades. Do ponto de vista macroscópico, coordenadas termodinâmicas são propostas para caracterização de diferentes sistemas. Mais importante, as relações entre coordenadas podem ser descritas por equações de estado.

No estudo magnético, a temperatura é uma grandeza importante, assim como a magnetização. A magnetização está associada à ordem espacial dos momentos magnéticos, enquanto a temperatura está associada a flutuações térmicas. Por serem grandezas macroscópicas de grande importância, é necessário conhecer as relações existentes entre elas. As equações que demonstram essas relações podem ser complexas. Em alguns casos, apenas resolvidas por métodos não analíticos. Assim, o presente trabalho tem como objetivo propor/implementar um algoritmo para a resolução de uma destas equações, assim como observar/interpretar o comportamento das grandezas.

2. METODOLOGIA

Desenvolvemos uma revisão teórica-matemática do modelo de spin $\frac{1}{2}$, ou “modelo de Ising”, em aproximação de alcance infinito. Baseado na mecânica estatística presente no livro de NISHIMORI (2001).

Uma das principais equações do modelo de Ising é o Hamiltoniano (Eq. 1). Ele trata da energia total existente na interação de dois sítios.

$$H = -J \sum_{\{ij\} \in B} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1)$$

Equação 1. O primeiro termo define as energias de cada sítio e a interação entre elas, o segundo é a energia de campo de cada sítio. (NISHIMORI, 2001).

O modelo de alcance infinito nos dá o Hamiltoniano (Eq. 2) e função de partição (Eq. 3) levados ao limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$. Com esse modelo temos a interação de todos os sítios existentes. Ao admitir o limite termodinâmico e linearizar o termo quadrático, com a integral Gaussiana, também obtemos a redução do problema de dois sítios para um único sítio.

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (2)$$

Equação 2. Hamiltoniano no modelo de alcance infinito.

$$Z = \text{Tr} \exp \left(\sum_i S_i \right)^2 - \frac{\beta J}{2} + B h \sum_i S_i, \quad (3)$$

Equação 3. Função de partição, termo quadrático deve ser linearizado para realização do traço (NISHIMORI, 2001).

Com intuito de realizar o traço, adicionamos a integral Gaussiana a Eq.(3), para linearizar o termo quadrático e possibilitar sua resolução. Com isso também campos auxiliares são introduzidos, sendo eles a própria magnetização.

$$Z = Tr \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp\left(-\frac{N\beta J m^2}{2} + \beta J m \sum_i S_i + B h \sum_i S_i\right), \quad (4)$$

Equação 4. Função de partição com termo quadrático linearizado (NISHIMORI, 2001).

Com a resolução da Eq.(4) mediante o traço e uso da condição ponto de sela para integral, podemos chegar a equação de energia livre em função da magnetização (Eq. 5), assim como definir a equação de estado da magnetização com a temperatura (Eq. 6).

$$F = \left[-\frac{\beta J}{2} m^2 + \log\{2 \cosh \beta(Jm + h)\} \right] / \beta \quad (5)$$

Equação 5. Energia livre em função da magnetização, considerando $h=0$, temos o comportamento demonstrado na Figura 1.1.

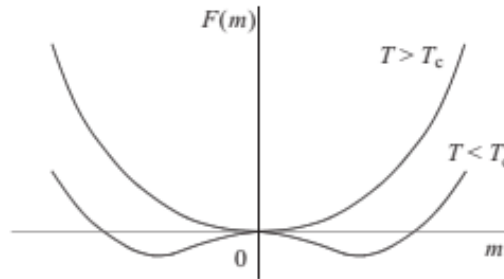


Figura 1.1. Energia livre em função do parâmetro de ordem (m) (NISHIMORI, 2001).

Percebemos que quando a temperatura do sistema é acima da crítica ($T > T_c$), o ponto de menor energia é trivial. Se a temperatura está abaixo da crítica ($T < T_c$), teoricamente, temos dois pontos de menor energia. $m = dF/dm = 0$.

$$m = \tanh \beta(mJ + h) \quad (6)$$

Equação 6. Equação de estado transcendental autoconsistente que relaciona a magnetização com a temperatura $m(T, m)$ (NISHIMORI, 2001).

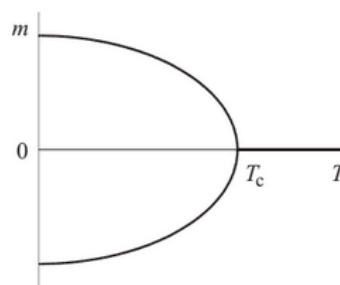


Figura 1.2. Comportamento teórico da Eq. (6) (NISHIMORI, 2001).

Em $T > T_c$, não há magnetização, o que caracteriza um sistema paramagnético. Em $T < T_c$, há magnetização sendo um sistema ferromagnético. O resultado teórico referente a parte positiva está de acordo com o resultado experimental visualizado na figura 1.3.

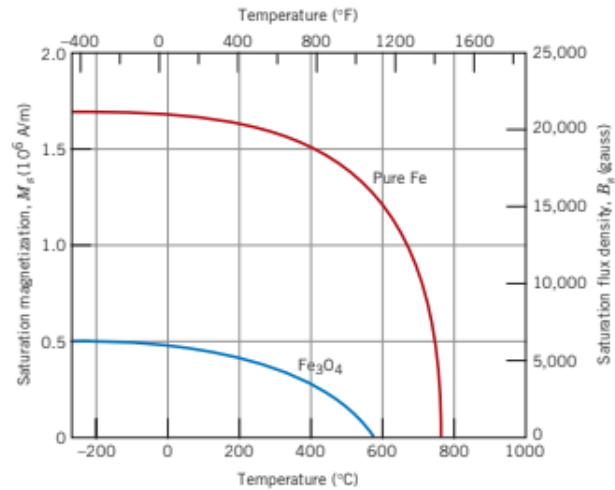


Figura 1.3. Comportamento experimental da magnetização em função da temperatura do Ferro Puro e do Óxido de Ferro (Fe_3O_4), como descrito pela Eq.(6), (CALLISTER, 1940).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após o estudo das equações descritas acima, as implementamos computacionalmente para confirmar seus comportamentos.

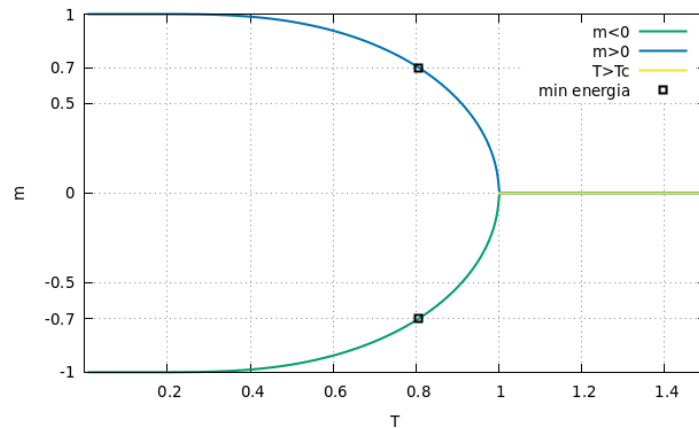


Figura 1.4. Resultado da implementação computacional da Eq.(6). Em comparação ao resultado teórico do comportamento da equação (Figura 1.2), $T_c=1$.

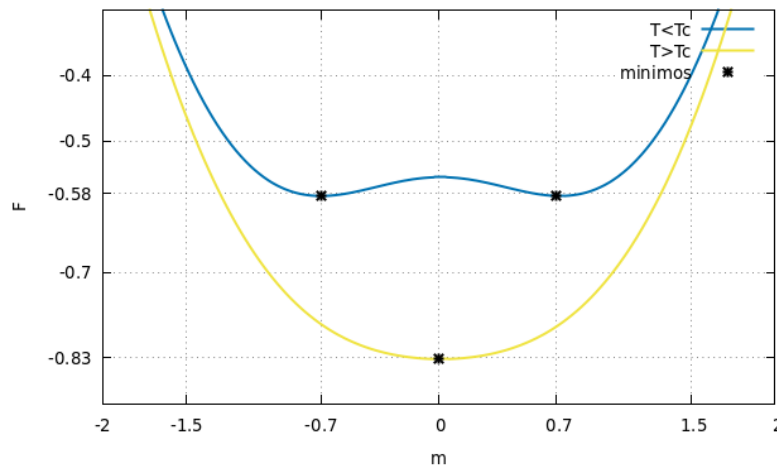


Figura 1.5. Comportamento computacional da Equação 1.5, energia livre em função da magnetização.

O resultado obtido computacionalmente segue o esperado do resultado conhecido na literatura (Figura 1.1).

Se compararmos os gráficos das figuras 1.4 e 1.5, podemos definir qual a temperatura que possui menor energia livre. Sendo a menor energia livre $\approx \pm 0,58$ e a magnetização $\approx \pm 0,7$. A temperatura que corresponde a $m \approx +0,7$ é $T \approx +0,8$. A temperatura com menor energia livre, e maior probabilidade do sistema, é $T \approx 0,8$.

4. CONCLUSÕES

Observa-se que a resolução da integral corresponde a troca do somatório contínuo pelo termo máximo da exponencial. Neste contexto, é preciso olhar somente para a contribuição em que o argumento da exponencial está no seu mínimo. Nesse contexto, buscou-se identificar o valor de m , que corresponde ao mínimo da função $F(m)$. Primeiramente, foi feita a análise da energia livre F . Após, para uma resolução mais geral, ou seja para varrer um alcance de temperatura, um método iterativo foi implementado para calcular o zero da função, corresponde ao mínimo do argumento da exponencial na Eq. (6). É visto que os resultados são equivalentes.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

NISHIMORI, H. **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing**: an Introduction. Londres: Clarendo Press, 2001.

CALLISTER, W.D. **Materials Science and Engineering**: an Introduction. Nova Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 1940. 7e.