

SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO APLICADA AO MODELO ISING 2D

EDUARDO FERREIRA DA SILVA¹; ARTHUR KRINDGES²; CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR³

¹*Universidade Federal de Pelotas – edu.ferreira056@gmail.com*

²*Universidade Federal de Pelotas – arthur.krindges@ufpel.edu.br*

³*Universidade Federal de Pelotas – cavmjunior@ufpel.edu.br*

1. INTRODUÇÃO

A Física da matéria condensada busca compreender as propriedades físicas de sistemas formados por um número extremamente grande de constituintes microscópicos, como átomos e elétrons, cujas interações mútuas são intensas e desempenham papel fundamental no comportamento coletivo da matéria. Estamos interessados na interatividade de spins em sistemas periódicos que ocasionam propriedades magnéticas, uma interpretação correta destas propriedades possibilita o desenvolvimento de novas tecnologias que vão desde o armazenamento de dados até aplicações na medicina (CALLISTER; RETHWISCH, 2020).

Estabelecemos a magnetização através do momento magnético intrínseco dos elétrons que provém de seu spin, o que gera um problema estocástico e de muitos corpos para sua descrição completa. Visando propriedades eletromagnéticas e termodinâmicas, como a magnetização, energia livre, susceptibilidade magnética e calor específico e suas relações com a temperatura do sistema, iremos utilizar o modelo Ising, um modelo de spin binário proveniente da mecânica estatística, que viabiliza entender pela modelagem o funcionamento de um sistema magnético (SALINAS, 2013).

Utilizando este modelo para definir as interações entre spins, implementaremos o método de simulação de Monte Carlo (MC) com dinâmica de Metropolis para um sistema em duas dimensões através de um algoritmo computacional. Este método baseia-se em uma amostragem estocástica (aleatória) dos estados do sistema, repetida iterativamente, permitindo sua evolução rumo ao equilíbrio termodinâmico e possibilitando a análise quantitativa de grandezas estatísticas, como média e o desvio padrão.

2. METODOLOGIA

Para a análise microscópica do sistema bidimensional, o modelo de Ising permite a contabilidade das interações de curto alcance entre pares de sítios, e seu Hamiltoniano, sem a presença de um campo externo, é definido por:

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

onde a variável de spin $S_{i,j}$ assume valores ± 1 nos sítios $i, j = 1, 2, \dots, N$. A soma é realizada sobre os pares de primeiros vizinhos e é mediada pela constante de

acoplamento J , que será fixada como $J = 1$, assumindo interações ferromagnéticas com intensidade unitária e simplificando os cálculos numéricos.

Para obtenção das quantidades macroscópicas, conectamos a mecânica estatística e a termodinâmica através da função de partição Z , que é a soma dos pesos estatísticos de todos os estados acessíveis do sistema em equilíbrio térmico, chamado ensemble canônico:

$$Z = \sum_i \exp(-\beta E_i), \quad (2)$$

na equação, $\exp(-\beta E_i)$ é o fator de Boltzmann, que atribui uma probabilidade relativa a cada configuração de energia E_i . O parâmetro β é o inverso da temperatura multiplicado pela constante de Boltzmann, ou seja, $\beta = 1/(k_B T)$.

O cálculo da equação 2 sobre todos os microestados é possível apenas para sistemas pequenos, visto que seu crescimento é exponencial com o número de spins, na forma 2^N para N sítios. O método de Monte Carlo com dinâmica de Metropolis (MCM) permite a aplicação da distribuição de Boltzmann de forma amostral estocástica, contornando a função de partição para obter o mesmo resultado.

O algoritmo de Metropolis utilizado neste trabalho, inicia com uma configuração inicial arbitrária do sistema $S_{i,j}$ e, a cada passo, propõe uma nova configuração pela inversão do spin em um sítio escolhido aleatoriamente. A energia E da nova configuração é comparada à anterior e a transição é aceita com uma probabilidade p definida por:

$$p = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta E \leq 0 \\ \exp(-\beta \Delta E), & \text{se } \Delta E > 0 \end{cases} \quad (3)$$

onde $\Delta E = E_{\text{nova}} - E_{\text{atual}}$. A probabilidade $p = \exp(-\beta \Delta E)$ é ainda comparada a um número aleatório $r \in (0, 1)$. Se $r \leq p$, a transição é aceita e o spin é invertido, caso contrário, a configuração atual é mantida e um novo sítio é sorteado para tentativa de atualização. Isso garante que o sistema evolua de acordo com a distribuição de Boltzmann, convergindo para o equilíbrio termodinâmico após uma etapa de termalização, que elimina as dependências em condições iniciais da temperatura.

Após a termalização, realizamos o cálculo das grandezas termodinâmicas em toda iteração, a energia E é calculada pela equação 1 enquanto a magnetização total m é calculada usando $m = \sum S(i, j)$, suas médias são obtidas fazendo,

$$\langle E \rangle = \frac{1}{MC} \sum_{t=1}^{MC} E_t \quad \langle |m| \rangle = \frac{1}{MC \cdot N^2} \sum_{t=1}^{MC} |m_t| \quad (4)$$

onde MC é o número de amostras após a termalização, N^2 é o número total de spins da rede. E_t e m_t são, respectivamente, a energia total e a magnetização no passo t .

Com os valores encontrados pelas equações 4, podemos encontrar também o calor específico C e a susceptibilidade magnética χ :

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N^2 T^2}, \quad \chi = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2}{NT}. \quad (5)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a obtenção dos resultados acerca das propriedades termodinâmicas discutidas na seção anterior, utilizamos uma rede 18×18 com condição de contorno periódica para emular a rede infinita, conforme a Figura 1 com $N = 18$.

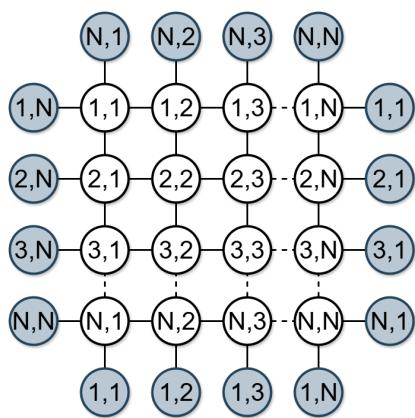


Figura 1: Rede de tamanho N . Fonte: Autor, 2025.

o calor específico e a suscetibilidade magnética em função da temperatura, apresentados respectivamente nas Figuras 2(b-d).

O primeiro passo para obtenção do valores médios via método de Monte Carlo no ensemble canônico é a termalização do sistema, apresentado na Figura 2(a) para $T/J_1 = 2.5$. Percebemos que a magnetização inicial imposta ao sistema não é aquela que o melhor representa. Assim, sucessivas iterações de MC são necessárias para levar o sistema ao equilíbrio térmico e com isso permitir o cálculo de valores médios, após 10^4 passos consideramos a termalização completa, evidenciada pelo platô nos valores da magnetização, a linha tracejada vermelha no gráfico indica um valor de $m = 0.35$, esta é a magnetização no equilíbrio.

Com a termalização do sistema garantindo o estado de equilíbrio, calculamos as principais propriedades termodinâmicas: a magnetização média,

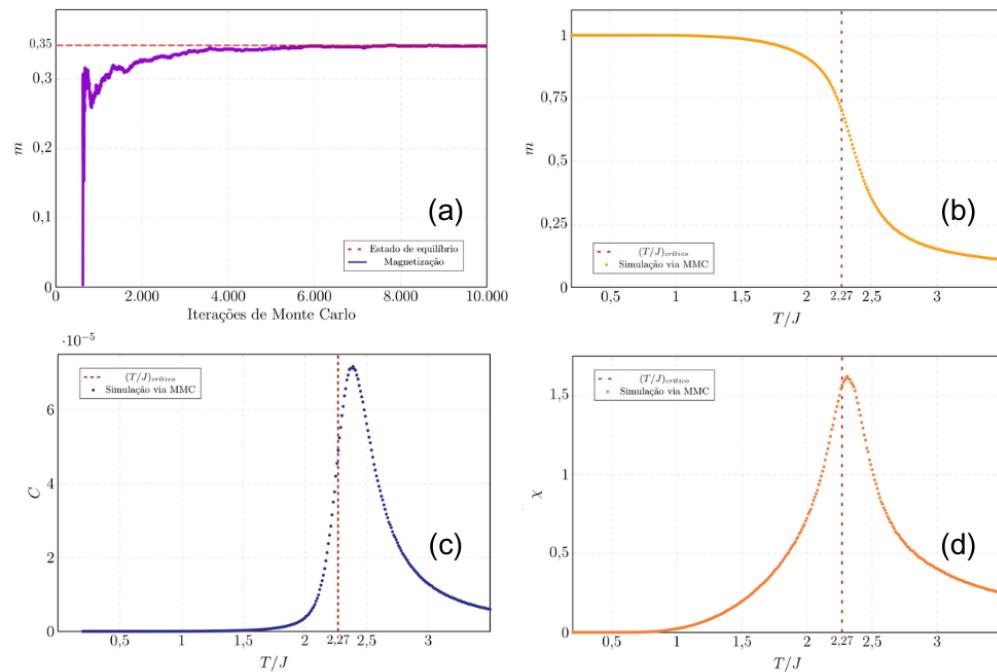


Figura 2: (a) Termalização para $T/J_1 = 2.5$; (b) Magnetização média; (c) Calor específico; (d) Suscetibilidade magnética; A temperatura crítica calculada por ONSAGER (1944) é $T_c = 2.2692J_1$ e foi marcada nos gráficos (b-d) por uma linha tracejada vermelha.

A Figura 2(b) ilustra o comportamento do parâmetro de ordem da magnetiza-

ção média. Observa-se que ele parte de um valor máximo, $m = 1$, e, à medida que a temperatura aumenta, sofre uma queda abrupta, indicando uma transição de fase por volta de $T/J \approx 2,25$. No entanto, o sistema não atinge a desmagnetização completa, já que o valor não chega a $m = 0$, isso é uma característica da escala finita da metodologia.

Ao analisar as demais grandezas termodinâmicas, o calor específico e a suscetibilidade magnética, notamos um comportamento que corrobora os resultados da magnetização. Conforme ilustrado nas Figuras 2(c-d), tanto o calor específico (C) quanto a suscetibilidade magnética (χ), ambos em função da temperatura reduzida (T/J), partem de valores nulos ou muito próximos de zero. Com o aumento da temperatura, essas duas grandezas apresentam um pico bem definido na mesma região onde a magnetização média (m) mostrou sua queda mais abrupta, em $T/J \approx 2,25$. A localização deste pico indica a temperatura crítica do sistema (T_c).

A presença de picos no calor específico e na suscetibilidade é a principal assinatura de uma transição de fase contínua (ou de segunda ordem). Enquanto a magnetização, que é o parâmetro de ordem, se aproxima quase de zero de forma contínua, suas derivadas de segunda ordem ($\chi = \frac{\partial m}{\partial H}$ e $C = \frac{\partial U}{\partial T}$) divergem. Ademais, o valor de transição em $T_c/J \approx 2,25$ obtido em nossos resultados está em concordância com a literatura. O trabalho de Onsager (1944) demonstra de forma exata que, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), a temperatura crítica do modelo de Ising 2D é $\frac{T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.2692$.

4. CONCLUSÕES

Neste trabalho, exploramos a eficácia do método de simulação de Monte Carlo com dinâmica de Metropolis para obtenção de grandezas macroscópicas termodinâmicas de um sistema magnético. O sistema simulado seguiu o modelo de Ising bidimensional para o cálculo da energia de interação entre spins, este modelo é frequente e consolidado na literatura, de forma que seus parâmetros são conhecidos para demonstrar a validade do método empregado. A concordância dos valores encontrados neste trabalho para a temperatura crítica, com os valores estabelecidos pela literatura, demonstra que o método foi eficaz dentro do regime imposto. Para futuros trabalhos, propomos a utilização do método MCM e da teoria de campo médio com cluster. Com o objetivo de comparar as metodologias em um sistema ligeiramente diferente: o modelo Blume-Capel, que incorpora a característica da anisotropia presente em sistemas magnéticos.

REFERÊNCIAS

- CALLISTER, W. D. J.; RETHWISCH, D. G. **Ciência e Engenharia de Materiais - Uma Introdução**. 10^a edição. ed. [S.I.]: LTC, 2020. ISBN 8521637284.
- ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 65, p. 117–149, Fev 1944.
- SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. 2^a edição. ed. São Paulo: EDUSP, 2013. ISBN 978-85-314-0386-6.