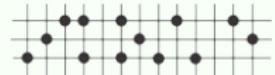




Universidade Federal de Santa Maria  
Centro de Ciências Naturais e Exatas  
Grupo de Teoria da Matéria Condensada

Laboratório de Teoria  
da Matéria Condensada



# O Modelo de Ising para sistemas clássicos

Mateus Schmidt

Santa Maria - RS, 2012

- O problema dos materiais ferromagnéticos;
- O Modelo de Ising;
- Teorias de Campo Médio;
- Soluções analíticas, métodos aproximativos e/ou simulações em diferentes estruturas;
  - Unidimensional;
  - Bidimensional;
  - Tridimensional;
- Outras aplicações para o Modelo de Ising;

# O problema dos materiais ferromagnéticos

Verificações experimentais apontavam para o fato de que o comportamento ferromagnético tinha relação direta com a temperatura, contudo, a análise macroscópica dos sistemas físicos não poderia explicar a magnetização espontânea. O comportamento universal dos expoentes críticos era um dos argumentos que apontava para a possibilidade de se propor um modelo que descrevesse o comportamento de alguns materiais, cujas propriedades ainda não tinham explicação.

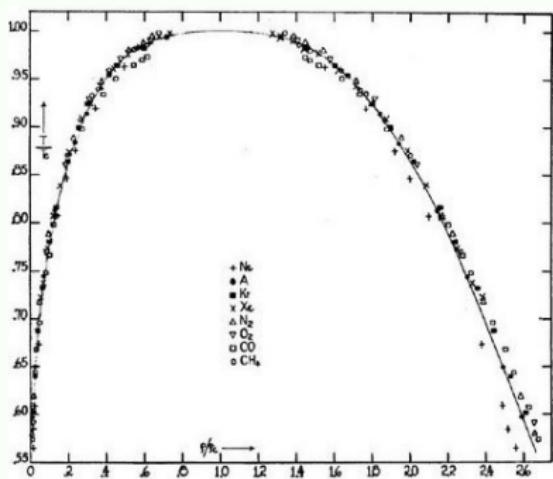


Figura: Dados reunidos por Guggenheim para a curva de coexistência de oito fluidos.

Ao contrário da curva sugerida pela equação de van der Waals (parabólica) os dados compilados por Guggenheim apresentam uma coexistência de configurações caracterizando uma equação cúbica.

Ou seja, as previsões das “teorias clássicas” (englobadas pela fenomenologia de Landau), como a de van der Waals (onde  $\beta = \frac{1}{2}$ ), tem expoentes críticos com valores distantes dos encontrados em experimentos ( $\beta \simeq \frac{1}{3}$ ).

Os expoentes críticos apresentam valores universais e são definidos pelos seguintes fatores:

- a dimensionalidade dos sistemas físicos;
- a dimensionalidade do parâmetro de ordem; e
- o alcance das interações microscópicas.

# O Modelo de Ising

Tornou-se interessante, portanto, olhar para as características microscópicas do sistema e modelar o comportamento de alguns dos seus elementos, buscando explicar o ferromagnetismo, considerando interações de curto alcance em uma rede d-dimensional.



$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

O Hamiltoniano ( $\mathcal{H}$ ) do Modelo de Ising relaciona a interação de troca  $J$  a cada uma das interações entre sítios vizinhos ( $\sigma_i \sigma_j$ ) que podem assumir os valores 1 ou -1. O termo  $H$  está relacionado ao campo sobre o sistema, que está associado à cada um dos spins ( $\sigma_i$ ).

O modelo portanto tem como característica principal assumir um binário,  $\pm 1$ , que são as variáveis de spin, mas que podem ser definidas de diversas formas, como componentes do spin dos átomos, como a ocupação ou não de um sítio em um gás de rede ou como a presença de um dos dois tipos de átomos de uma liga binária qualquer. Proposto por Wilhelm Lenz ao seu orientando Ernst Ising em 1920, o modelo foi solucionado para uma estrutura unidimensional por Ising em 1924 e para uma rede quadrada (2D) por Lars Onsager em 1944.

Como consequência da sua simplicidade o Modelo de Ising tem vasta aplicação no tratamento estatístico, sendo considerado um dos modelos mais importantes.

# Teorias de Campo Médio

- A simplicidade do modelo torna-o muito útil para testar a eficiência dos métodos aproximativos.
- Muitas teorias foram desenvolvidas para implementar métodos aproximativos que permitissem obter soluções para o Modelo de Ising.
- O desenvolvimento da Mean Field Theory (MFT), obtendo um comportamento qualitativamente correto dos sistemas com duas e três dimensões, abriu caminho para o aprimoramento e desenvolvimento de diversas teorias de campo médio melhoradas.
- Pela MFT a temperatura crítica ( $T_C$ ) da magnetização é definida através da equação auto-consistente  $m = \tanh(m\beta z + \beta H)$ , onde  $z$  é o número de coordenação, que está relacionado ao número de primeiros vizinhos de cada sítio na rede em questão.
- Na MFT, quando  $H = 0$ ,  $T_C = z$ , portanto haveria magnetização mesmo em uma rede unidimensional. Considerando que nesta rede cada spin possuiria dois primeiros vizinhos ( $z = 2$ ), a transição de fase, com campo nulo, ocorreria na  $T_c = 2$ .
- Boa parte das teorias de campo médio melhoradas dependem fortemente do número de coordenação;

# Solução em uma dimensão

Partimos do Hamiltoniano de Ising  $\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$  e o reescrevemos

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{H}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i + \sigma_{i+1}$$

Podemos expressar a função canônica de partição ( $Z_N = \sum_{\text{config.}} e^{-\beta \mathcal{H}}$ ) na forma

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

Onde  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$  é a matriz de transferência, cujos autovalores são

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} [\cosh(\beta H) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}}]$$

Como  $\lambda_1 \geq \lambda_2$ , no limite termodinâmico e a campo nulo ( $H = 0$ ), a função canônica de partição torna-se então

$$Z_N = \text{Tr}(D^N) = \lambda_1^N$$

# Solução em uma dimensão

Podemos expressar a energia livre do sistema na forma

$$g(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln(\lambda_1^N)$$

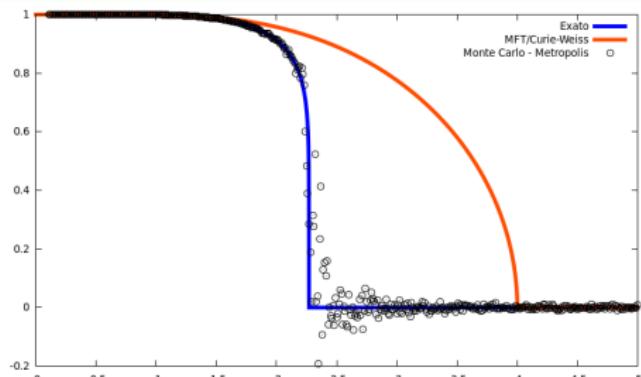
A energia livre por spin é dada por

$$g(T, H) = -\frac{K_B T}{N} N \ln(\lambda_1)$$

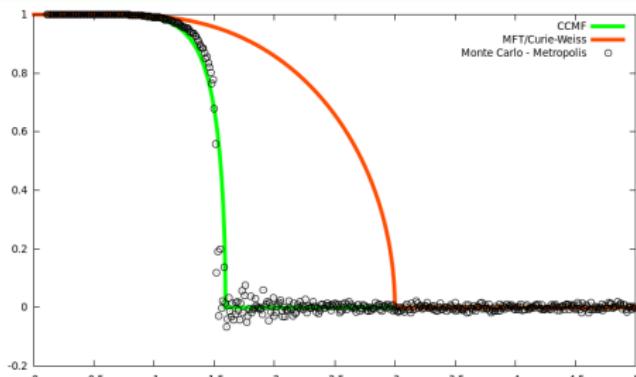
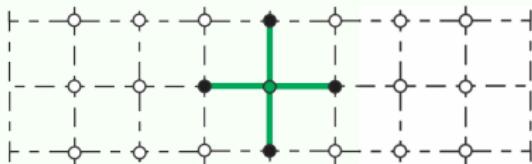
A magnetização por spin será dada por  $m = \frac{\partial g}{\partial H}$  sendo

$$m = \frac{\partial(-K_B T \ln(e^{\beta J} [\cosh(\beta H) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta H) + e^{-4\beta J}}])))}{\partial H} = 0$$

# Solução exata, simulação e métodos aproximativos para estruturas bidimensionais



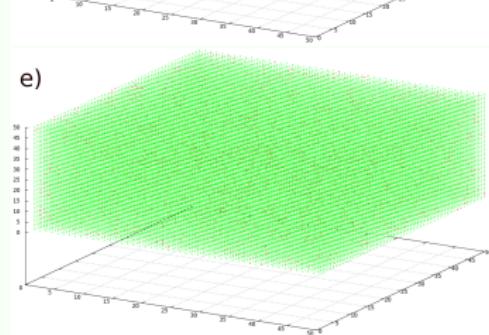
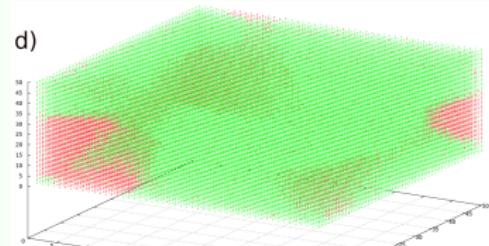
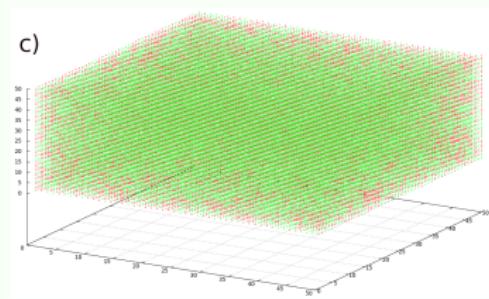
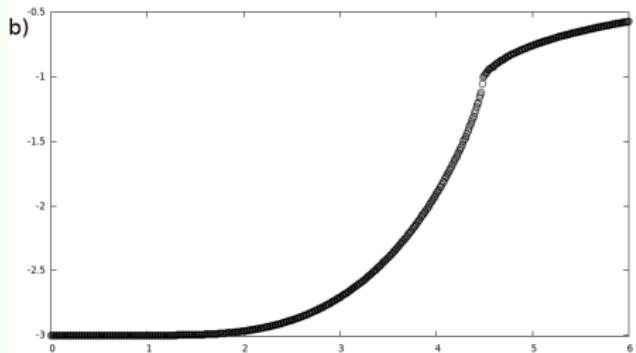
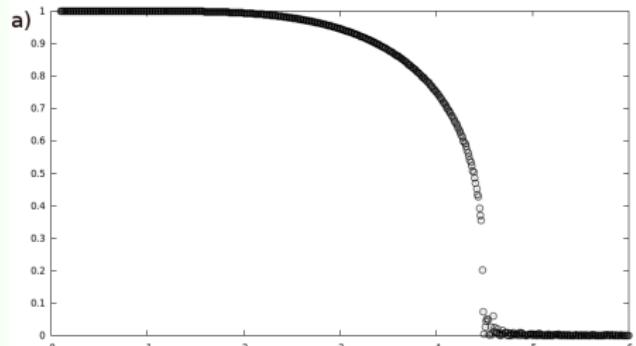
Magnetização em função da temperatura em uma rede quadrada: a linha azul mostra o resultado exato obtido por Lars Onsager, em 1944; a linha laranja mostra a curva segundo a MFT ( $z = T_C = 4$ ); os círculos são a compilação dos dados obtidos através da simulação do Método de Monte Carlo.



Magnetização em função da temperatura em uma rede em formato favo de mel: a linha verde mostra a relação obtida com o método *Correlated Clusters Mean Field Theory*; na linha laranja a curva é dada pela MFT ( $z = T_C = 3$ ); os círculos são a compilação dos dados obtidos através da simulação do Método de Monte Carlo.



# Simulação para estrutura tridimensional



Simulação utilizando o Método de Monte Carlo para rede cúbica:  
a) Magnetização versus Temperatura; b) Energia versus Temperatura; c) Fase paramagnética; d) Formação de ilhas de correlação; e) Fase ferromagnética;

# Outras aplicações para o Modelo de Ising

## Social phase transition in Solomon network

K. Malarz

Department of Applied Computer Science, Faculty of Physics and Nuclear Techniques, University of Mining and Metallurgy (AGH)  
al. Mickiewicza 30, PL-30059 Kraków, Poland.

February 1, 2008

### Abstract

In this paper the Solomon network is simulated by means of 1D and 2D Ising model with additional — not only geometrical — neighbors. A “social phase transition” at a non-zero Curie-like temperature is observed, also in one dimension. The critical exponent describing the behavior of the magnetization in the vicinity of the transition is also evaluated.

## A Diffusive Strategic Dynamics for Social Systems

E. Agliari

Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Parma, viale Ushberti 7/A, 43100 Parma, Italy and  
Theoretische Polymerphysik, Universität Freiburg,  
Hermann-Herder-Str. 3, D-79104 Freiburg, Germany

R. Burioni

Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Parma, viale Ushberti 7/A, 43100 Parma, Italy and  
INFN, Gruppo collegato di Parma, Viale Ushberti 7/A, 43100 Parma, Italy

P. Contucci

Dipartimento di Matematica, Università di Bologna,  
Piazza di Porta S. Donato 5, 40126 Bologna, Italy

We propose a model for the dynamics of a social system, which includes diffusive effects and a biased rule for spin-flips, reproducing the effect of strategic choices. This model is able to mimic some phenomena taking place during marketing or political campaigns. Using a cost function based on the Ising model defined on the typical quenched interaction environments for social systems (Erdős-Renyi graph, small-world and scale-free networks), we find, by numerical simulations, that a stable stationary state is reached, and we compare the final state to the one obtained with standard dynamics, by means of total magnetization and magnetic susceptibility. Our results show that the diffusive strategic dynamics features a critical interaction parameter strictly lower than the standard one. We discuss the relevance of our findings in social systems.

## Statistical Physics for Humanities:

### A Tutorial

Dietrich Stauffer

by

The image of physics is connected with simple “mechanical” deterministic events: that an apple always falls down, that force equals mass times acceleration. Indeed, applications of such concept to social or historical problems go back two centuries (population growth and stabilisation, by Malthus and by Verhulst) and use “differential equations”, as recently reviewed by Vitanov and Andoos [2011]. However, since even today’s computers cannot follow the motion of all air molecules within one cubic centimeter, the probabilistic approach has become fashionable since Ludwig Boltzmann invented Statistical Physics in the 19th century. Computer simulations in Statistical Physics deal with single particles, a method called agent-based modelling in fields which adopted it later. Particularly simple are binary models where each particle has only two choices, called spin up and spin down by physicists, live and die by one by computer scientists, and voters for the Republicans or for the Democrats in American politics (where one human is simulated as one particle). Neighbouring particles may influence each other, and the Ising model of 1925 is the best-studied example of such models. This text will explain to the reader how to program the Ising model on a square lattice (in Fortran language); starting from there the readers can build their own computer programs. Some applications of Statistical Physics outside the natural sciences will be listed.

## MONTE CARLO SIMULATIONS OF OPINION DYNAMICS

S. FORTUNATO

Fakultät für Physik, Universität Bielefeld,  
D-33501, Bielefeld, Germany  
and

Dipartimento di Fisica e Astronomia and INFN sezione di Catania,

Università di Catania,  
Catania I-95123, Italy

E-mail: fortunat@physik.uni-bielefeld.de

We briefly introduce a new promising field of applications of statistical physics, opinion dynamics, where the systems at study are social groups or communities and the atoms/spins are the individuals (or agents) belonging to such groups. The opinion of each agent is modeled by a number, integer or real, and simple rules determine how the opinions vary as a consequence of discussions between people. Monte Carlo simulations of consensus models lead to patterns of self-organization among the agents which fairly well reproduce the trends observed in real social systems.