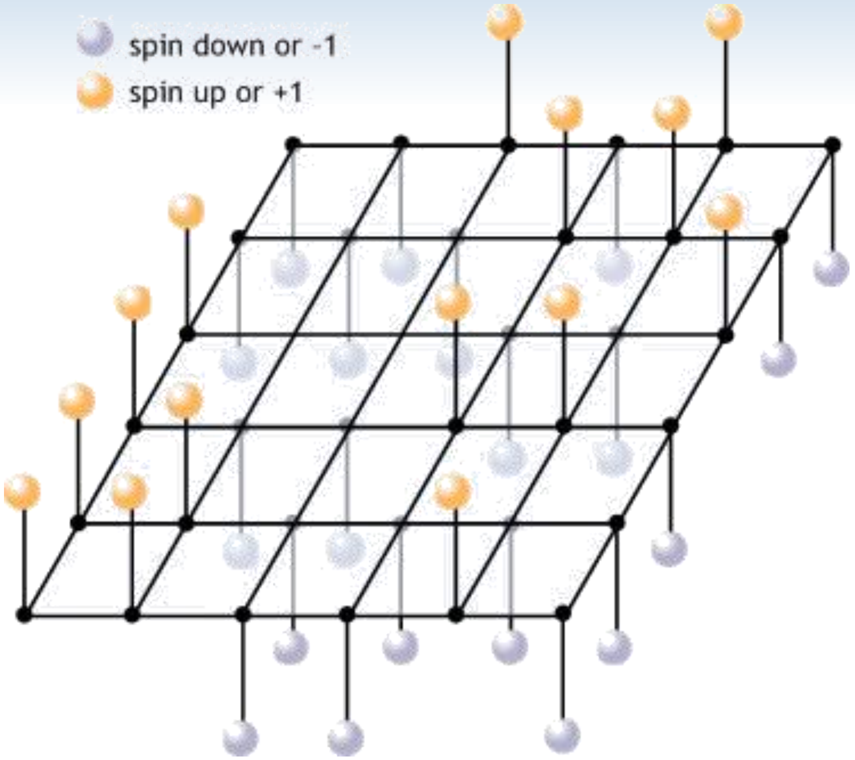
A solução de Onsager para o modelo de Ising em 2D: a complexidade do **Magnetismo Quântico**



IFUSP

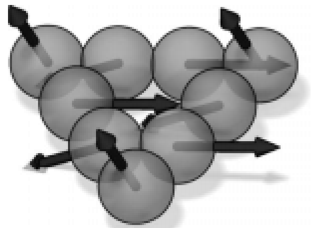
Ivan de Paula Miranda

26 de novembro, 2015

Nanomagnetismo

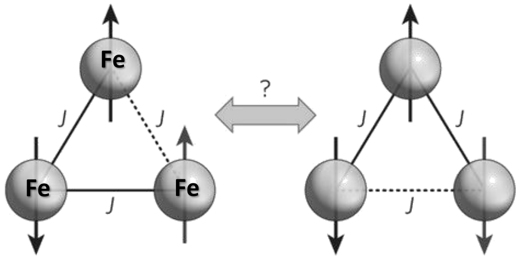
- Redução do tamanho → **efeitos quânticos individuais**
- Desenvolvimento de técnicas experimentais (**STM**) e teóricas (**DFT**)

Frustrações magnéticas



A. Bergman *et al.*, Phys. Rev. B 75, 224425 (2007)

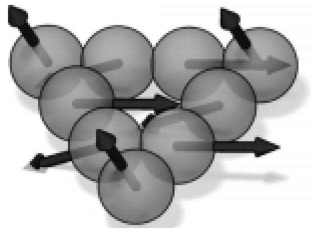
$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$



Nanomagnetismo

- ❑ Redução do tamanho → **efeitos quânticos individuais**

Frustrações magnéticas



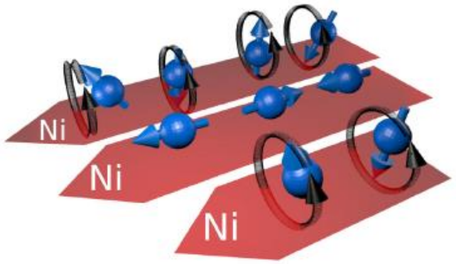
A. Bergman *et al.*, Phys. Rev. B 75, 224425 (2007)

Efeitos de paridade

S. Lounis *et al.*, Phys. Rev. Lett. 101, 107204 (2008)

Energia de ponto zero > K
(flutuação dos momentos)

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega=\frac{g\mu_B}{2M}\sqrt{-4K\cos(2\phi_0)[4J_1\cos(2\theta_0)+2J_2\cos(\theta_0)+4K\cos(2\theta_0)\cos^2(\phi_0)]-[4K\cos(\theta_0)\sin(2\phi_0)]^2}$$

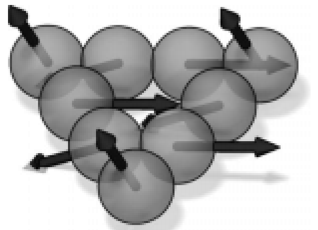


S. Holzberger *et al.*, Phys. Rev. Lett. 110, 157206 (2013)

Nanomagnetismo

- Redução do tamanho → **efeitos quânticos individuais**

Frustrações magnéticas

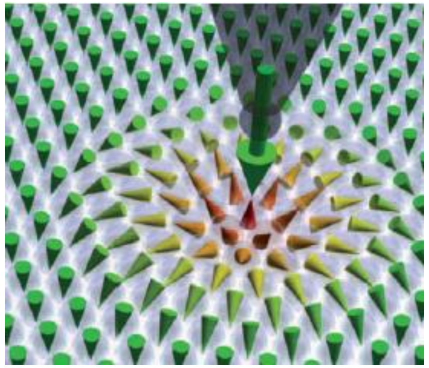


A. Bergman *et al.*, Phys. Rev. B 75, 224425 (2007)

Efeitos de paridade

S. Lounis *et al.*, Phys. Rev. Lett. 101, 107204 (2008)

Skyrmions



N. Romming *et al.*, Science 341, 636 (2013)

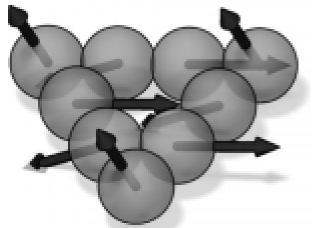
$$S = \frac{1}{4\pi}\oint_s \left(\frac{\partial \hat{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \hat{n}}{\partial y}\right) \cdot \hat{n} dS \Rightarrow \begin{cases} S = 1 \Rightarrow \mathit{Skyrmion} \\ S = -1 \Rightarrow \text{Anti-}\mathit{Skyrmion} \\ S = 0 \Rightarrow \text{Estado trivial (FM)} \end{cases}$$

$\hat{n}$ é o vetor normalizado de magnetização

Nanomagnetismo

- Redução do tamanho → **efeitos quânticos individuais**

Frustrações magnéticas

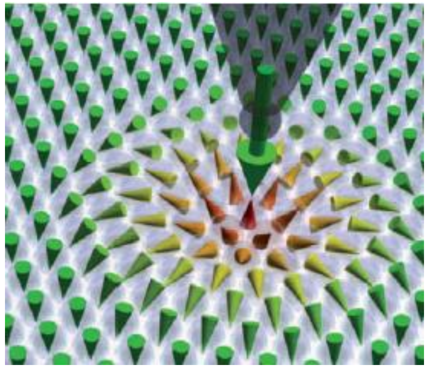


A. Bergman *et al.*, Phys. Rev. B 75, 224425 (2007)

Efeitos de paridade

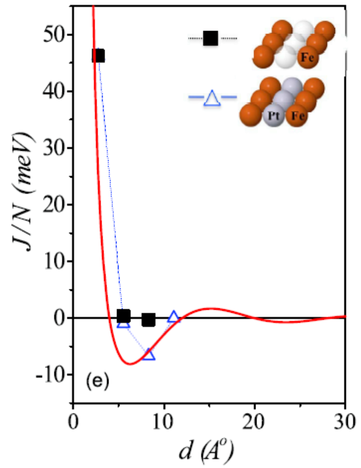
S. Lounis *et al.*, Phys. Rev. Lett. 101, 107204 (2008)

Skyrmions



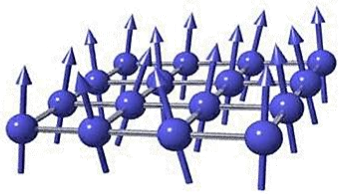
N. Romming *et al.*, Science 341, 636 (2013)

Interação RKKY



M. M. Bezerra-Neto *et al.*, Sci. Rep. 3, 3054 (2013)

Elétrons de condução (itinerantes) → ordem magnética de longo alcance (terras-raras)

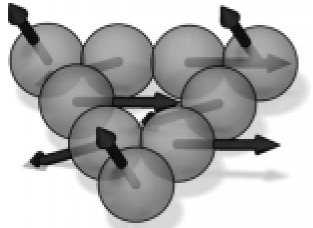


$$H(\mathbf{R}_{ij}) = \frac{\vec{I}_i \cdot \vec{I}_j}{4} \frac{|\Delta k_m k_m|^2\, m^*}{(2\pi)^3 R_{ij}^4 \hbar^2} \left[2k_m R_{ij}\cos(2k_m R_{ij}) - \sin(2k_m R_{ij})\right]$$

Nanomagnetismo

- Redução do tamanho → **efeitos quânticos individuais**

Frustrações magnéticas

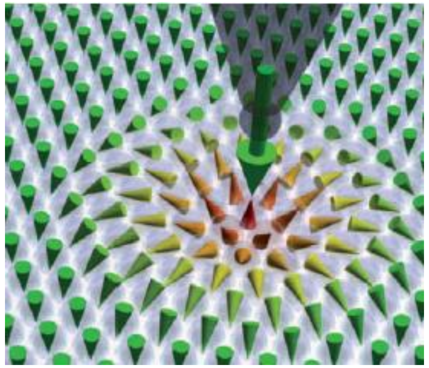


A. Bergman *et al.*, Phys. Rev. B 75, 224425 (2007)

Efeitos de paridade

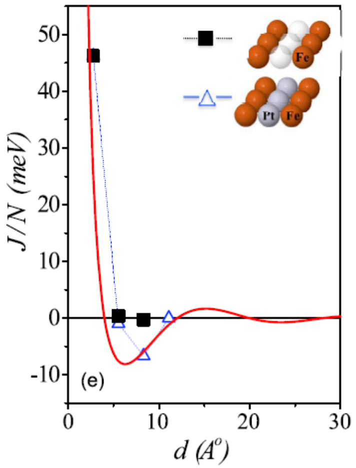
S. Lounis *et al.*, Phys. Rev. Lett. 101, 107204 (2008)

Skyrmions



N. Romming *et al.*, Science 341, 636 (2013)

Interação RKKY



M. M. Bezerra-Neto *et al.*, Sci. Rep. 3, 3054 (2013)

- Entendimento desses efeitos → **desenho <u>racional</u> de novos dispositivos**

A Interação de Troca

- Modelo fundamental para o **Magnetismo Quântico**.

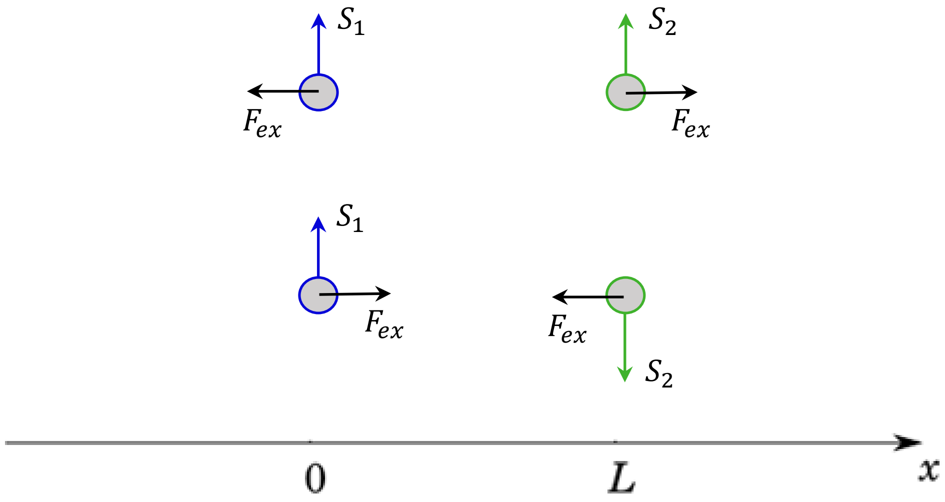
$$E_{ex} = C - \frac{1}{2}J_{ex} - 2J_{ex}\vec{s}_a \cdot \vec{s}_b$$

$$J_{ex} = \int \Phi_a(\vec{r}_1)\Phi_b(\vec{r}_2)\left(\frac{1}{R_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b2}}\right)\Phi_b(\vec{r}_1)\Phi_a(\vec{r}_2)\, d^3r_1\, d^3r_2$$

Partículas indistinguíveis (férmions) + interação
de Coulomb: princípio de exclusão de Pauli

A Interação de Troca

- Modelo fundamental para o **Magnetismo Quântico**.



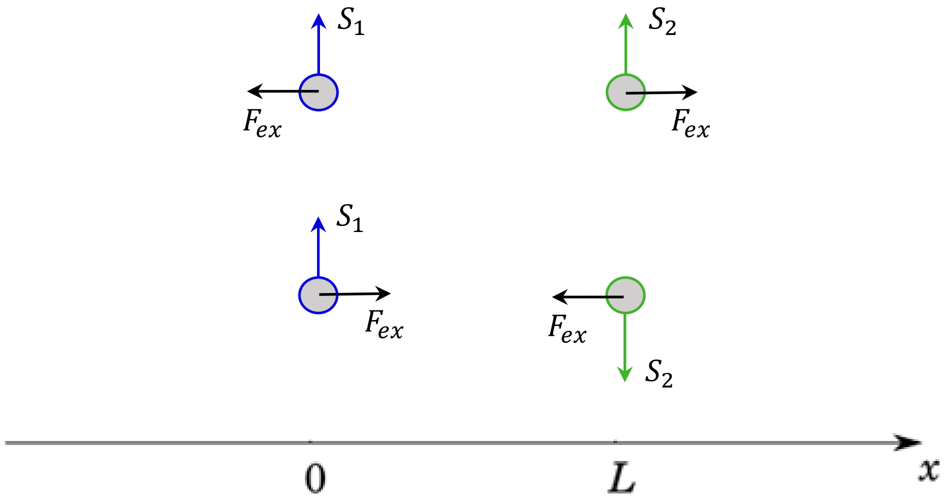
Partículas indistinguíveis (férmions) + interação de Coulomb: princípio de exclusão de Pauli

- **Generalização de Heisenberg** para um cristal ($\mathbf{S}_i$ é o operador de *spin* no sítio *i*):

$$\mathcal{H} = -2\sum_{i<j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

A Interação de Troca

- Modelo fundamental para o **Magnetismo Quântico**.



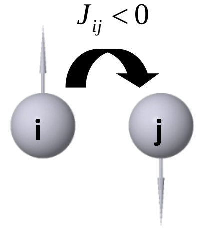
Partículas indistinguíveis (férmions) + interação de Coulomb: princípio de exclusão de Pauli

- **Generalização de Heisenberg** para um cristal ($\mathbf{S}_i$ é o operador de *spin* no sítio *i*):

$$\mathcal{H} = -2\sum_{i<j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

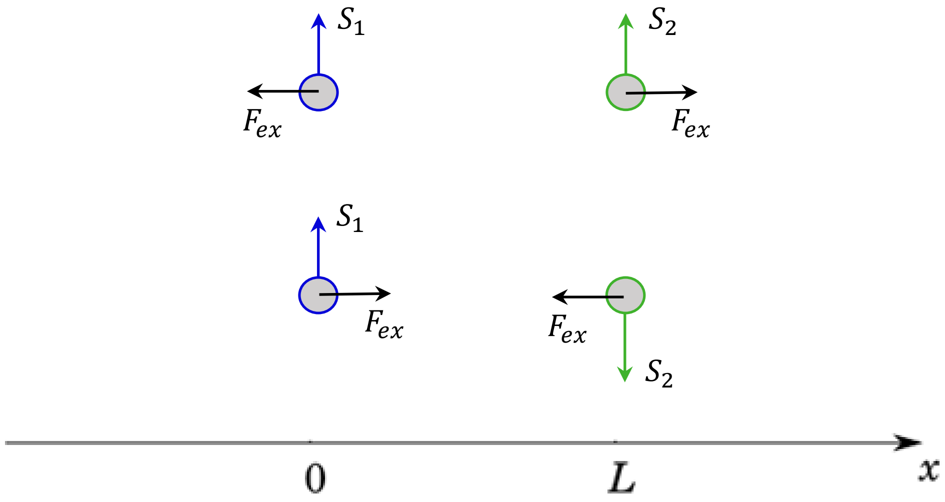
Menor energia

Antiferromagnético



A Interação de Troca

- Modelo fundamental para o **Magnetismo Quântico**.

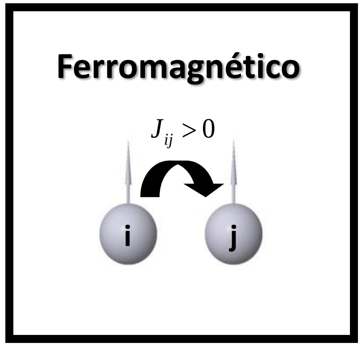


Partículas indistinguíveis (férmions) + interação de Coulomb: princípio de exclusão de Pauli

- **Generalização de Heisenberg** para um cristal ($\mathbf{S}_i$ é o operador de *spin* no sítio *i*):

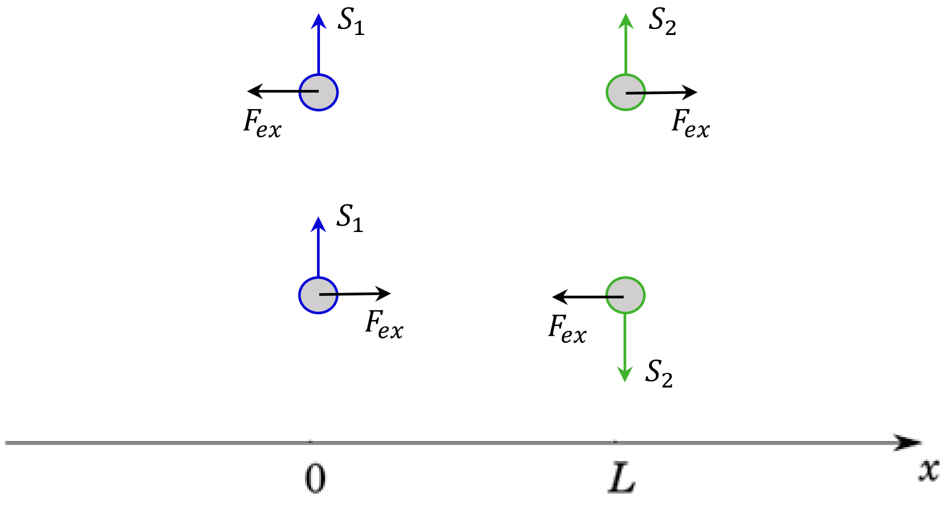
$$\mathcal{H} = -2\sum_{i<j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

Menor energia



A Interação de Troca

- Modelo fundamental para o **Magnetismo Quântico**.



Partículas indistinguíveis (férmions) + interação de Coulomb: princípio de exclusão de Pauli

Para **duas** partículas: $\mathbf{S}_{tot} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$
(coeficientes de Clebsch-Gordan)

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}[S_{tot}(S_{tot}+1) - 2S(S+1)]$$

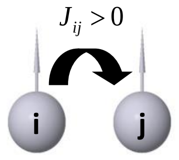
Para **mais** partículas: **solução complexa!**
$[\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2] \neq 0$

- **Generalização de Heisenberg** para um cristal ($\mathbf{S}_i$ é o operador de *spin* no sítio *i*):

$$\mathcal{H} = -2\sum_{i<j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

Menor energia

Ferromagnético



A Interação de Troca

- Modelo fundamental para o **Magnetismo Quântico**.

Competição entre a **temperatura** e a **interação entre *spins***

Para **duas** partículas: $\mathbf{S}_{tot} = \mathbf{S_1} + \mathbf{S_2}$
(coeficientes de Clebsch-Gordan)

$$\mathbf{S_1} \cdot \mathbf{S_2} = \frac{1}{2}[S_{tot}(S_{tot}+1) - 2S(S+1)]$$

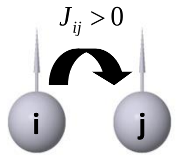
Para **mais** partículas: **solução complexa!**
$[\mathbf{S_1}, \mathbf{S_2}] \neq 0$

- **Generalização de Heisenberg** para um cristal ($\mathbf{S}_i$ é o operador de *spin* no sítio *i*):

$$\mathcal{H} = -2\sum_{i<j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

Menor energia

Ferromagnético



A Interação de Troca

- Primeira aproximação: **interações de curto alcance**: $J_{ij} = \begin{cases} J_0, \text{se } i \text{ e } j \text{ são vizinhos} \\ 0, \text{caso contrário} \end{cases}$

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z$$

- Segunda aproximação: **campo médio**.

  Assumindo o eixo *z* como direção de magnetização

$$\boldsymbol{m} = 2\sum_j J_{ij}\langle S_z\rangle\hat{\boldsymbol{k}} = 2nJ_0\langle S_z\rangle\hat{\boldsymbol{k}}$$

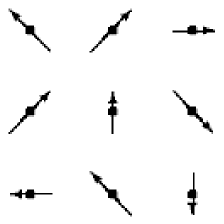
$$\mathcal{H} = -2\sum_i \boldsymbol{m}\cdot\mathbf{S}_i + Nm\langle S_z\rangle$$

Magnetização espontânea:

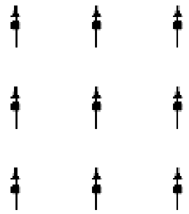
$$M(T) \propto (T - T_C)^b$$

Campo médio: $b = \frac{1}{2}$

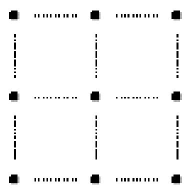
$$\beta = \frac{1}{k_B T} \qquad S = \frac{1}{2} \Rightarrow Z = \left(e^{\beta m} + e^{-\beta m}\right)^N e^{\beta N m\langle S_z\rangle} = \boxed{\left[\left(e^{\beta m} + e^{-\beta m}\right)e^{\beta m^2/2nJ_0}\right]^N}$$



Desordenado



Ordenado



n

Interação entre NN

- Hamiltoniano de Ising: **sistema com *spins* em uma direção em particular**. $\mathcal{H} = -2J_0\sum_i S_i^z S_{i+1}^z$

A Interação de Troca

- Primeira aproximação: **interações de curto alcance**: $J_{ij} = \begin{cases} J_0, \text{se } i \text{ e } j \text{ são vizinhos} \\ 0, \text{caso contrário} \end{cases}$

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z$$

- Segunda aproximação: **campo médio**.

  Assumindo o eixo *z* como direção de magnetização

$$\boldsymbol{m} = 2\sum_j J_{ij}\langle S_z\rangle\hat{\boldsymbol{k}} = 2nJ_0\langle S_z\rangle\hat{\boldsymbol{k}}$$

$$\mathcal{H} = -2\sum_i \boldsymbol{m}\cdot\mathbf{S}_i + Nm\langle S_z\rangle$$

- Modelo **bidimensional** de Ising

PHYSICAL REVIEW VOLUME 65, NUMBERS 3 AND 4 FEBRUARY 1 AND 15, 1944

Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition

LARS ONSAGER

Sterling Chemistry Laboratory, Yale University, New Haven, Connecticut

(Received October 4, 1943)

- Hamiltoniano de Ising: **sistema com *spins* em uma direção em particular**. $\mathcal{H} = -2J_0\sum_i S_i^z S_{i+1}^z$

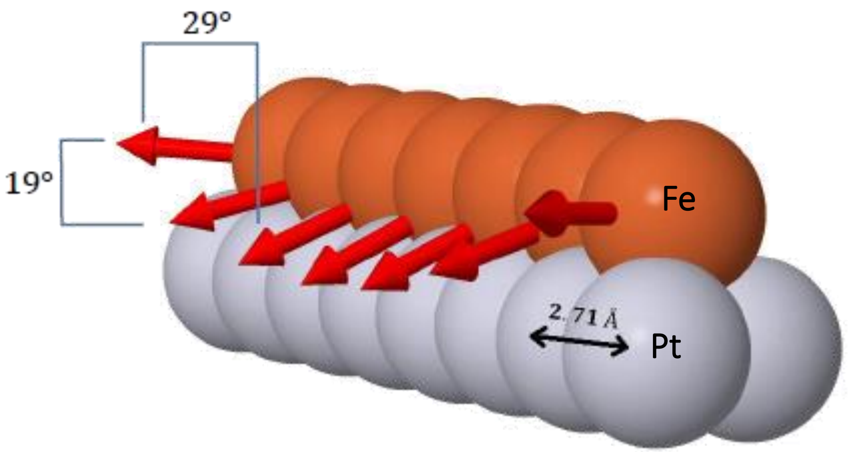
Dzyaloshinskii-Moriya e Correções

- Modelo **fenomenológico** baseado na Teoria de Landau (interação antissimétrica).

$$\boxed{\mathcal{H}_{DM} = \sum_{i,j} \vec{D}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j}$$

Correção possível ao modelo de Heisenberg

- Manifestação do acoplamento ***spin*-órbita** ($\lambda \boldsymbol{S} \cdot \mathbf{L}$).



Dzyaloshinskii-Moriya e Correções

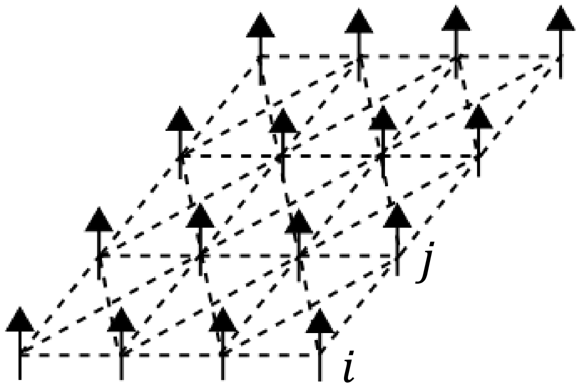
TB

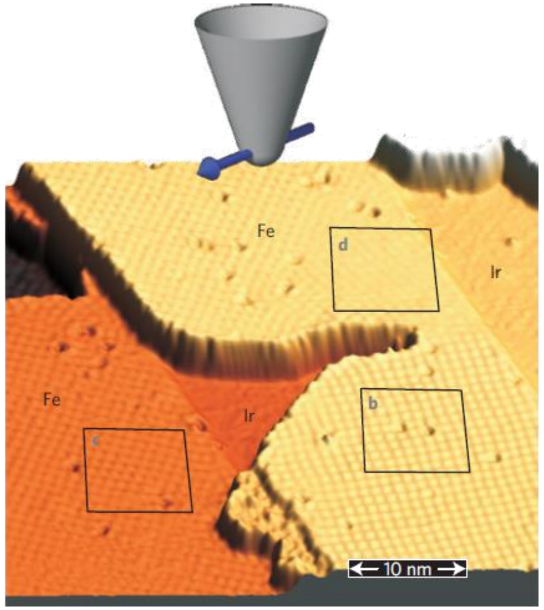
$$H = -t \sum_{j\delta} c^{\dagger}_{j+\delta} c_j$$

- Outras correções (**4-*spin***: A. H. MacDonald *et al.*, Phys. Rev. B **37**, 9753 (1988)):

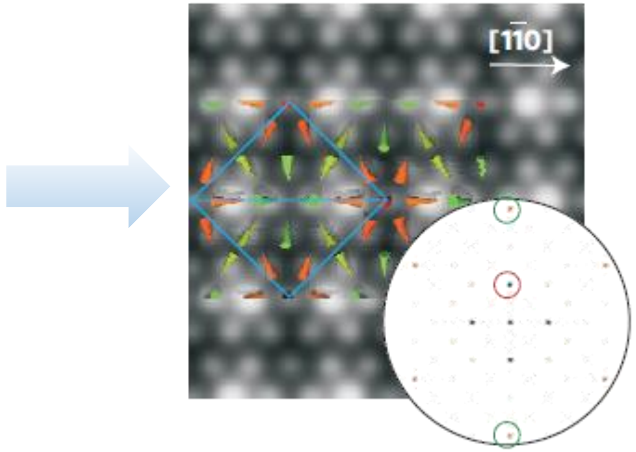
$$\mathcal{H}_{4S} = \sum_{i,j,k,l} K_{ijkl}\left[(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l) + (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l)(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k) - (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k)(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l)\right]$$

Consequência da possibilidade de *Hopping* eletrônico nos 4 sítios adjacentes (extensão do mod. Hubbard)





Estrutura espontânea de *spins* → Fe/Ir(111)



S. Heinze *et al.*, Nature Phys. 7, 713 (2011)

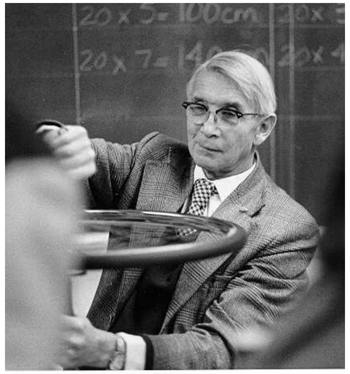
Modelo de Ising

- ❑ dd=1 e dd=2).
- ❑ Um dos **únicos** modelos “realistas” de muitos corpos rigorosamente resolvidos $(= \mathbf{1}\ \boldsymbol{e}\ \boldsymbol{d} = \mathbf{2})$.

$\sim \mathbf{1920}$

Wilhelm Lenz

Propôs



Ernst Ising

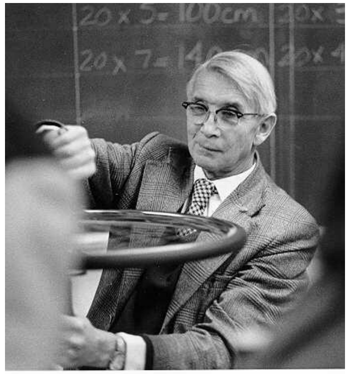
Modelo de Ising

- Um dos **únicos** modelos “realistas” de muitos corpos rigorosamente resolvidos ($d = 1$ e $d = 2$).

$\sim \mathbf{1920}$

Wilhelm Lenz

Propôs



Ernst Ising

Aplicações: modelo “clássico”

- Modelo para isolantes magnéticos;
- *Toy-model* para Mecânica Estatística;
- Modelo para ligas binárias:
  $S = +1$ (Átomo **A**) $\leftrightarrow$ $S = -1$ (Átomo **B**)
- Modelo para materiais ferroelétricos;
- Modelo para sistemas biológicos.

Grandezas escalares

Heisenberg “simplificado”

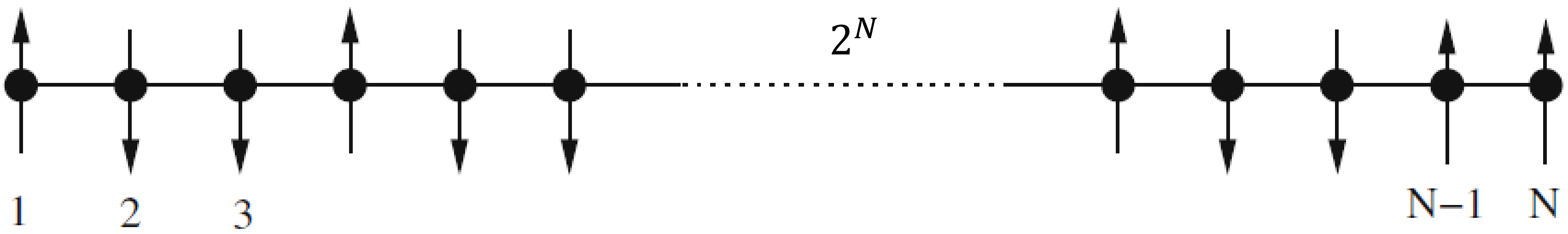
Assumindo o eixo *z* como direção de magnetização

$$\mathcal{H} = \boxed{-\sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z} \boxed{- \mu_B B_0 \sum_i S_i^z} \qquad S_i^z = \pm 1, \text{ para } i = 1,2,\ldots,N$$

Interação com $\boldsymbol{B_0}$ (se $\boldsymbol{B_0 \neq 0}$)

Modelo de Ising 1D

- Cadeia linear com N *spins* $(B_0 = 0)$: $J_{ij} = \begin{cases} J_i, \text{se } j = (i \pm 1) \\ 0, \text{caso contrário} \end{cases}$ $\qquad \boldsymbol{T_c}? \Longrightarrow \boldsymbol{M}$ **(espontânea)**



[a]

$$j_i = \frac{J_i}{k_B T} = \beta J_i$$

$$\boxed{S_i = \pm 1, \text{ para } i = 1,2,\dots,N}$$

- Função de partição canônica (Z_N):

$$Z_N = Z_N(j_1,\ j_2, \cdots,\ j_{N-1}) = \sum_{S_1}^{\pm 1} \sum_{S_2}^{\pm 1} \cdots \sum_{S_N}^{\pm 1} exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} j_i S_i S_{i+1} \right)$$

[a] W. Nolting and A. Ramakanth, Quantum Theory of Magnetism, Springer, 2009

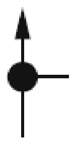
Modelo de Ising 1D

- Para obter uma relação de **recursão**, basta calcular o mesmo para uma cadeia com 1 *spin* a mais:

$$Z_{N+1} = \sum_{S_1}^{\pm 1} \sum_{S_2}^{\pm 1} \cdots \sum_{S_N}^{\pm 1} exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} j_i S_i S_{i+1} \right) \boxed{\sum_{S_{N+1}}^{\pm 1} exp(j_N S_N S_{N+1})}$$

- Mas, como $\sum_{S_{N+1}}^{\pm 1} \exp(j_N S_N S_{N+1}) = [\exp(j_N S_N) + \exp(-j_N S_N)] = 2\cosh(j_N S_N) = 2\cosh(j_N)$:

$$Z_{N+1} = 2\, Z_N\, cosh(j_N)$$

- Em termos da função de partição de uma só partícula: 

$\Rightarrow \quad Z_{N+1} = Z_1\, 2^N \prod_{i=1}^{N} \cosh(j_i)$

Modelo de Ising 1D

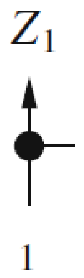
- Para obter uma relação de **recursão**, basta calcular o mesmo para uma cadeia com 1 *spin* a mais:

$$Z_{N+1} = \sum_{S_1}^{\pm 1} \sum_{S_2}^{\pm 1} \cdots \sum_{S_N}^{\pm 1} exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} j_i S_i S_{i+1} \right) \boxed{\sum_{S_{N+1}}^{\pm 1} exp(j_N S_N S_{N+1})}$$

- Mas, como $\sum_{S_{N+1}}^{\pm 1} \exp(j_N S_N S_{N+1}) = [\exp(j_N S_N) + \exp(-j_N S_N)] = 2\cosh(j_N S_N) = 2\cosh(j_N)$:

$$Z_{N+1} = 2\, Z_N\, cosh(j_N)$$

<u>Sem interações</u> $Z_1 = \sum_{S_1}^{\pm 1} e^0 = 2 \Leftarrow$



$\Rightarrow Z_{N+1} = Z_1\, 2^N \prod_{i=1}^{N} \cosh(j_i)$

Modelo de Ising 1D

- Finalmente:

$$Z_N(T) = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} \cosh\left(\frac{J_i}{k_B T}\right)$$

- E, assumindo $J_i = J$ (interação **isotrópica**): $\boxed{Z_N(T) = 2^N \ \cosh^{N-1}(\beta \ J)}$

- Assim, derivamos a função de **correlação de *spin***:

$$\langle S_i S_{i+j}\rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{S\}} S_i \ S_{i+j} exp\left(\sum_{k=1}^{N-1} j_k \ S_k \ S_{k+1}\right)$$

- Partindo da primeira **expressão** para Z_N: $Z_N = Z_N(j_1, \ j_2, \cdots, \ j_{N-1}) = \sum_{S_1}^{\pm 1} \sum_{S_2}^{\pm 1} \cdots \sum_{S_N}^{\pm 1} exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} j_i S_i S_{i+1}\right)$

Modelo de Ising 1D

$$\frac{\partial}{\partial j_i}\frac{\partial}{\partial j_{i+1}}\cdots\frac{\partial}{\partial j_{i+j-1}} Z_N$$

$$= \sum_{\{S\}} (S_i \underbrace{S_{i+1})(S_{i+1}}_{+1} S_{i+2}) \cdots \underbrace{(S_{i+j-1}}_{+1} S_{i+j}) * exp\left(\sum_{k=1}^{N-1} j_k\ S_k\ S_{k+1}\right)$$

$$= \sum_{\{S\}} (S_i\ S_{i+j}) exp\left(\sum_{k=1}^{N-1} j_k\ S_k\ S_{k+1}\right)$$

$$= Z_N \langle S_i\ S_{i+j} \rangle$$

- Partindo da primeira **expressão** para Z_N: $\boxed{Z_N = Z_N(j_1,\ j_2, \cdots,\ j_{N-1}) = \sum_{S_1}^{\pm 1} \sum_{S_2}^{\pm 1} \cdots \sum_{S_N}^{\pm 1} exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} j_i S_i S_{i+1}\right)}$

Modelo de Ising 1D

- Assim, usando o **fato** que:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial j_i}\dfrac{\partial}{\partial j_{i+1}}\cdots\dfrac{\partial}{\partial j_{i+j-1}} Z_N = Z_N \langle S_i\ S_{i+j}\rangle \\[2ex] Z_N(T) = 2^N \displaystyle\prod_{i=1}^{N-1} \cosh\left(\frac{J_i}{k_B T}\right) \end{cases}$$

- Chegamos em:

$$\langle S_i\ S_{i+j}\rangle = \frac{2^N \cosh(j_1)\cdots\cosh(j_{i-1})\sinh(j_i)\cdots\sinh(j_{i+j-1})\cdots\cosh(j_{N-1})}{2^N \cosh(j_1)\cdots\cosh(j_{N-1})}$$

$$\Downarrow$$

$J_i = J$ **(isotrópico)**

$$\langle S_i\ S_{i+j}\rangle = \prod_{r=1}^{j} \tanh(\beta J_{i+r-1}) \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\langle S_i\ S_{i+j}\rangle = \tanh^j(\beta J)}$$

Modelo de Ising 1D

$$M_s^2(T) = \mu_B^2 \langle S \rangle^2 = \mu_B^2 \lim_{j\to\infty} \langle S_i \; S_{i+j} \rangle$$

$$M_s(T) = \mu_B \begin{cases} 0 & if \; T \neq 0 \\ 1 & if \; T = 0 \end{cases}$$

$J_i = J$ **(isotrópico)**

$$\langle S_i \; S_{i+j} \rangle = \prod_{r=1}^{j} \tanh\left(\beta J_{i+r-1}\right) \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\langle S_i \; S_{i+j} \rangle = \tanh^j(\beta J)}$$

Modelo de Ising 1D

O modelo de Ising unidimensional *não* apresenta transição de fase à temperatura finita (magnetização espontânea em $T < T_c$)

$$M_s^2(T) = \mu_B^2 \langle S \rangle^2 = \mu_B^2 \lim_{j \to \infty} \langle S_i \; S_{i+j} \rangle$$

$$\boxed{M_s(T) = \mu_B \begin{cases} 0 \;\; if \; T \neq 0 \\ 1 \;\; if \; T = 0 \end{cases}}$$

$J_i = J$ (isotrópico)

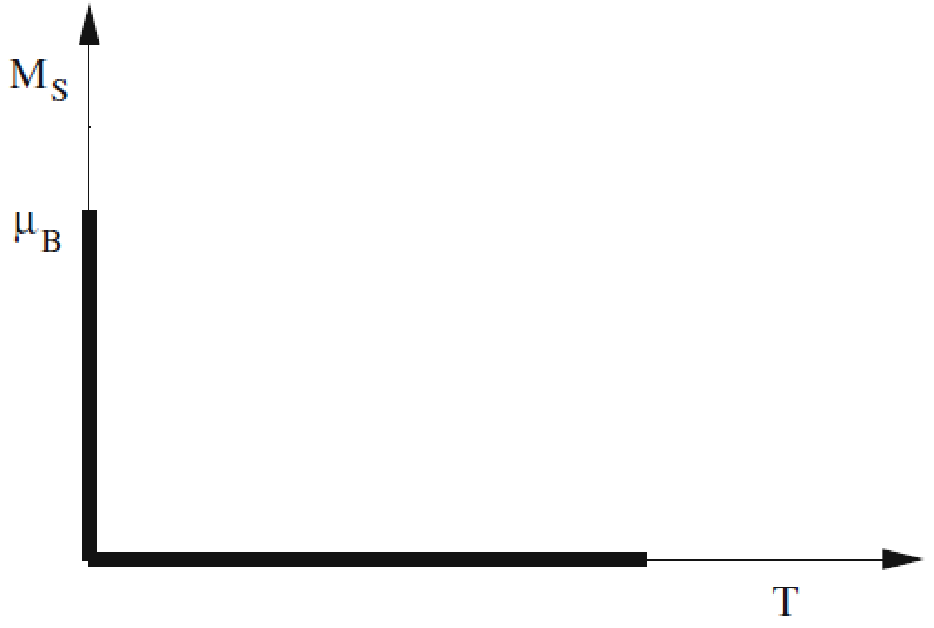
$$\langle S_i \; S_{i+j} \rangle = \prod_{r=1}^{j} \tanh\left(\beta J_{i+r-1}\right) \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\langle S_i \; S_{i+j} \rangle = \tanh^j(\beta J)}$$

Modelo de Ising 1D

O modelo de Ising unidimensional *não* apresenta transição de fase à temperatura finita (magnetização espontânea em $T < T_c$)

$$M_s^2(T) = \mu_B^2 \langle S \rangle^2 = \mu_B^2 \lim_{j \to \infty} \langle S_i \; S_{i+j} \rangle$$

$$\boxed{M_s(T) = \mu_B \begin{cases} 0 & if\ T \neq 0 \\ 1 & if\ T = 0 \end{cases}}$$



$J_i = J$ (isotrópico)

$$\boxed{\langle S_i \; S_{i+j} \rangle = \tanh^j(\beta J)}$$

Modelo de Ising 1D

O modelo de Ising unidimensional *não* apresenta transição de fase à temperatura finita (magnetização espontânea em $T < T_c$)

+

E. Ising *não* conseguiu resolver o modelo para *duas* e *três* dimensões

$$M_s^2(T) = \mu_B^2 \langle S \rangle^2 = \mu_B^2 \lim_{j \to \infty} \langle S_i \; S_{i+j} \rangle$$

$$\boxed{M_s(T) = \mu_B \begin{cases} 0 \;\; if \; T \neq 0 \\ 1 \;\; if \; T = 0 \end{cases}}$$

Wilhelm Lenz

$J_i = J$ **(isotrópico)**

$$\boxed{\langle S_i \; S_{i+j} \rangle = \tanh^j(\beta J)}$$

- Outra solução analítica possível (1D): $\boldsymbol{B_0 \neq 0}$

Modelo de Ising 2D

Lars Onsager

1968 (Química)

- ***Antes*** da prova exata **(em 1944 por Lars Onsager),** Peierls[a] demonstrou a existência de uma transição de fase ferromagnética (FM) $\Leftrightarrow$ paramagnética a uma temperatura finita ($T_c > 0$) para o modelo de Ising bidimensional;

- Assim, iniciamos com uma Hamiltoniana de Ising válida para interações entre primeiros vizinhos e sem campo magnético externo ($B_0 = 0$) $\longrightarrow$ **isotrópico** ($J_{ij} = J$):

$$\mathcal{H}(S) - J \sum_{(i,j)} S_i^z S_j^z \Longrightarrow S_i^z = \pm 1, \text{ para } i = 1,2,\ldots,N$$

$(i,j) \longrightarrow$ **Pares próximos**

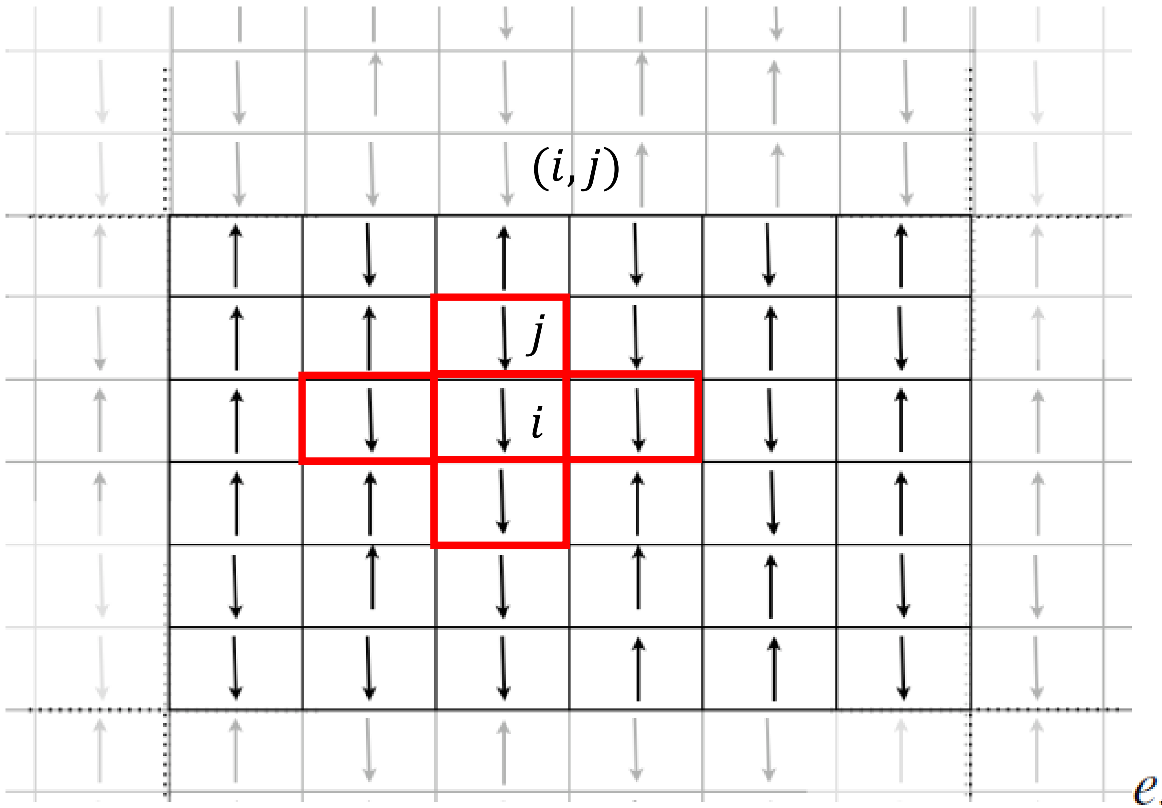
- Analogamente ao modelo 1D:

$$Z_N(T) = \sum_{\{S\}} exp(-\beta\ H(S))$$

[a]R. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc. 32, 477 (1936)

Modelo de Ising 2D

- **Rede** de *spins* finita (suficientemente grande):



$$T_c? \implies \boldsymbol{M}\ \textbf{(espontânea)}$$

- Para encontrar a transição de fase:

$$f(T) = \lim_{N\to\infty}\left[-\frac{k_B T}{N}\ln Z_N(T)\right]$$

- A "assinatura" de uma transição de fase deve ocorrer como uma **irregularidade** da energia livre f.

- Uma vez que $S_i = \pm 1$ $(v = \tanh(\beta J))$:

$$exp(\beta\ J\ S_i\ S_j) = \cosh(\beta\ J)(1 + v(S_i\ S_j))$$

Modelo de Ising 2D

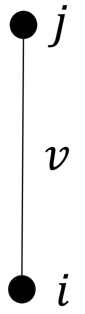
- Como vamos tomar o **limite termodinâmico**, desconsideramos efeitos de superfície:

  - Existem $4N$ pares de vizinhos mais próximos, sendo que, por semelhança, restam $2N$ pares distintos. Assim, pela expressão de $Z_N(T)$:

$$Z_N(T) = \sum_{\{S\}} exp\left(\beta\ J \sum_{(i,j)} S_i\ S_j\right)$$
$$= \cosh^{2N}(\beta\ J) \sum_{\{S\}} (1 + vS_{i_1}\ S_{j_1}) \cdots (1 + vS_{i_{2N}}\ S_{j_{2N}})$$

Cada interação

$(S_i S_j) \longrightarrow$



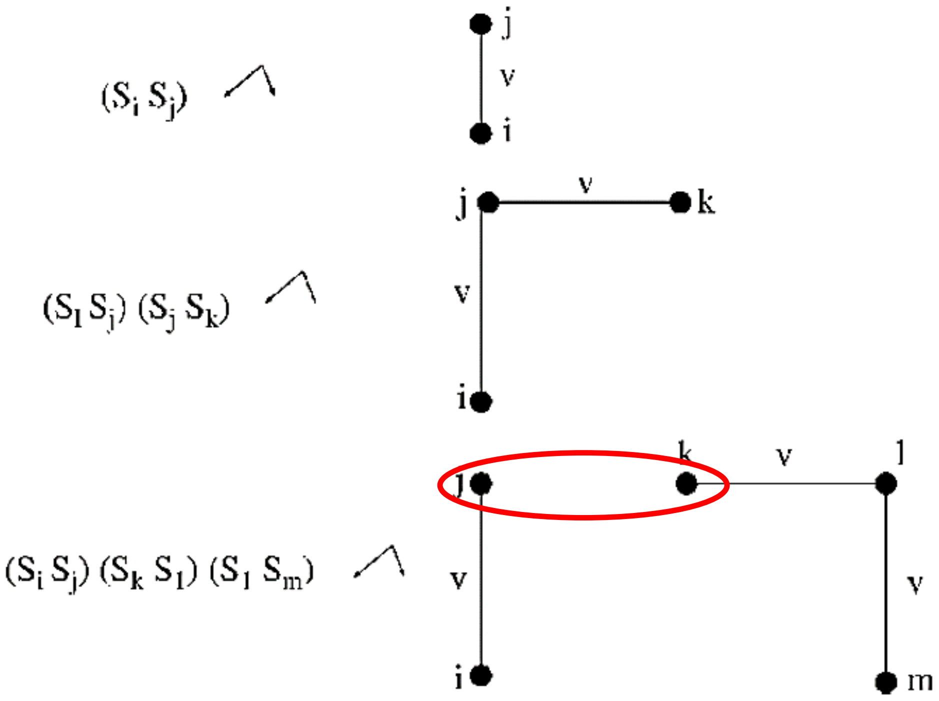
Ou, rearranjando os termos:

$$Z_N(T) = \cosh^{2N}(\beta\ J) \sum_{\{S\}} \left[1 + v \sum_{\nu=1}^{2N} S_{i_\nu}\ S_{j_\nu} + \boxed{v^2 \sum_{\substack{\nu,\mu=1 \\ \nu\neq\mu}}^{2N} (S_{i_\nu}\ S_{j_\nu})(S_{i_\mu}\ S_{j_\mu})} + \cdots \right]$$

"Spin products"

Modelo de Ising 2D

- Alguns **exemplos**:



Portanto, como há apenas interação entre primeiros vizinhos:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, \text{se primeiros vizinhos} \\ 0, \text{caso contrário} \end{cases}$$

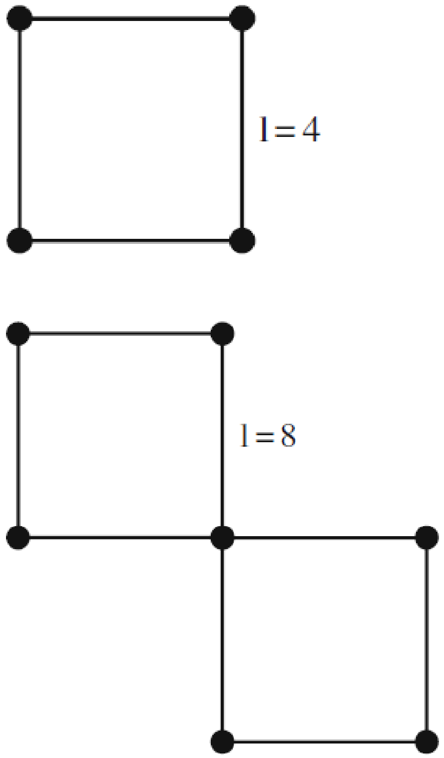
Então:

$$\sum_{\{S\}} (S_{i\alpha}\, S_{j\alpha}) \ldots (S_{i\rho}\, S_{j\rho}) = \begin{cases} 2^N, \text{para todos vértices ordem } \mathbf{par} \\ 0, \text{caso contrário} \end{cases}$$

W. Nolting and A. Ramakanth, Quantum Theory of Magnetism, Springer, 2009

Modelo de Ising 2D

- Alguns **exemplos**:



Portanto, como há apenas interação entre primeiros vizinhos:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, \text{se primeiros vizinhos} \\ 0, \text{caso contrário} \end{cases}$$

Então:

$$\sum_{\{S\}} (S_{i\alpha}\, S_{j\alpha}) \ldots (S_{i\rho}\, S_{j\rho}) = \begin{cases} 2^N, \text{para todos vértices ordem } \textbf{par} \\ 0, \text{caso contrário} \end{cases}$$

W. Nolting and A. Ramakanth, Quantum Theory of Magnetism, Springer, 2009

Modelo de Ising 2D

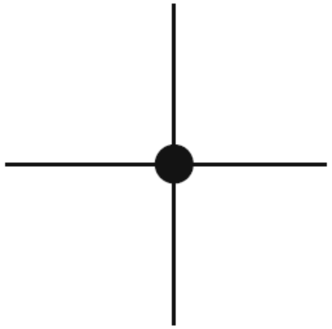
- Logo, usando a **função** $Z_N(T)$:

$$Z_N(T) = \cosh^{2N}(\beta\ J)\ 2^N \sum_{l=0}^{\infty} g_l v^l$$

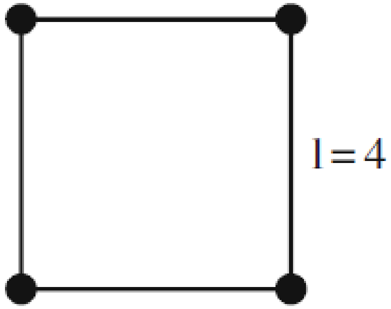
Onde l é o número de **linhas** nos gráficos com vértices pares, e g_l é o número de **gráficos** deste tipo ($g_0 \equiv 1$).

- Assim, nos resta determinar a quantidade de ***loops*** (g_l):

Um **nó**:

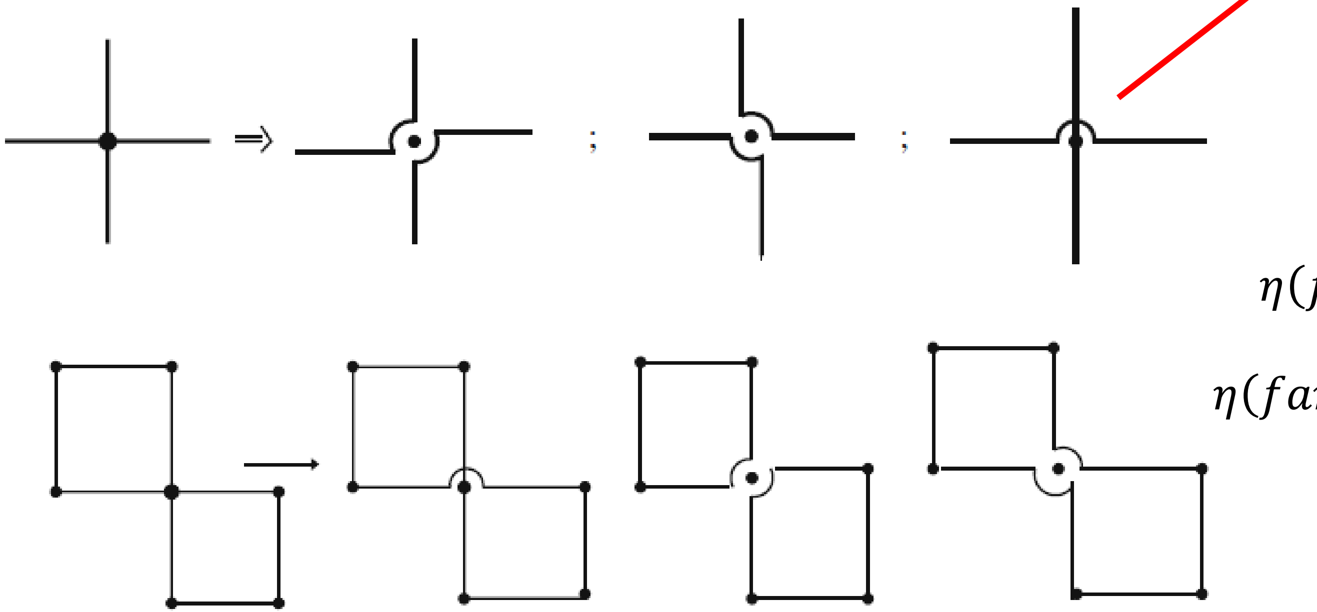


Um ***loop***:



- Método para ***dissolver*** estes nós:

***Self-intersection* (SI)**



Fator peso η:

$$\eta(loop) = (-1)^{SI}$$

$$\eta(família) = \prod \eta(loop)$$

$$\eta(família) = (-1)^{SI\ na\ família}$$

Gera 3^k famílias de *loops* para k nós $\Longrightarrow$ implica na quantidade g_l

Modelo de Ising 2D

- É possível mostrar que:

g_l é a soma dos pesos de todas as famílias de *loops* de um total de l linhas

- Assim, introduzindo uma **nova** quantidade:

$$D_l \equiv \text{Soma dos pesos de todos os loops com } l \text{ linhas}$$

$$\Downarrow$$

$$g_0 = 1$$

Correção para que não sejam contadas **várias** vezes

$$g_l = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{l_1, \cdots, l_n \\ \sum l_i = l}} D_{l_1} D_{l_2} \cdots D_{l_n} \qquad (l \neq 0)$$

Modelo de Ising 2D

- E, portanto:

$$g_l \, v^l = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{l_1,\cdots,l_n \\ \sum l_i = l}} \left(D_{l_1} v^{l_1}\right) \cdots \left(D_{l_n} v^{l_n}\right) \qquad (l \neq 0)$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} g_l \, v^l = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} D_m \, v^m \right\}^n = exp \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} D_m \, v^m \right\}$$

(pois temos que somar de $l = 0$ a $l = \infty$)

Neste caso, o vínculo $\sum l_i = l$ não faz mais sentido.

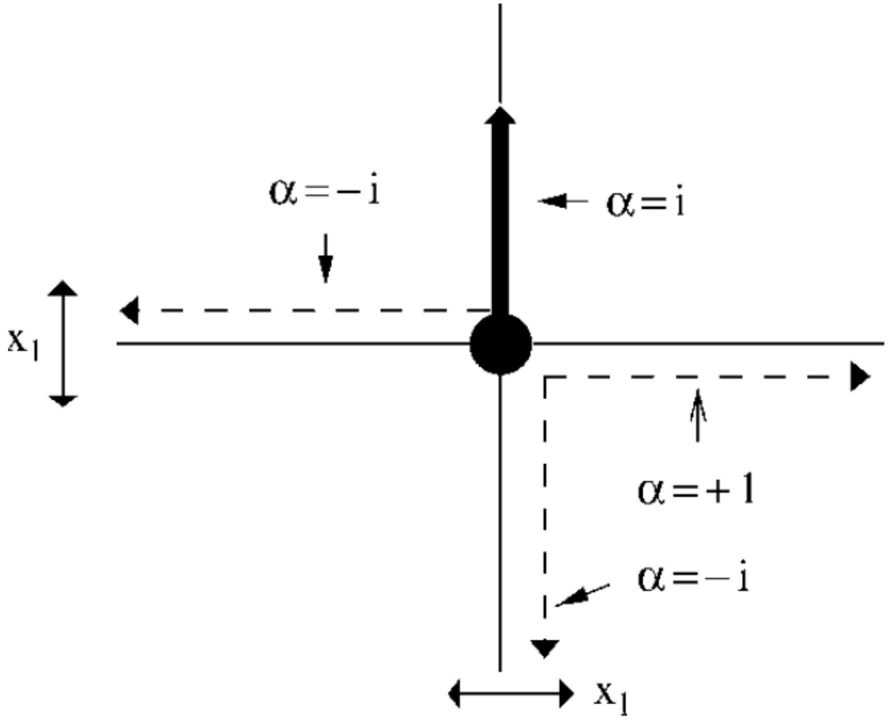
Modelo de Ising 2D

- Deste resultado, a **função de partição canônica** torna-se:

Contar quantos **SI** existem em um *loop*

$$Z_N(T) = 2^N \cosh^{2N}(\beta\ J) exp \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} D_m\ v^m \right\}$$

- Então, introduzindo um *step* $P = (z, \alpha)$ (imaginando a rede de Ising no **plano complexo**):



Modelo de Ising 2D

...

$$M^2(T) = \mu_B^2 \lim_{m\to\infty} \langle S_{1,1} S_{1,1+m} \rangle$$

- Chega-se na **energia livre** por *spin* ($f(T)$):

$$-\beta f(T) = \ln 2 + \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} dq_1 dq_2 \ln[(1-\sinh(2\beta J))^2 + \sinh(2\beta J)(2-\cos q_1 - \cos q_2)]$$

Magnetização espontânea:

$$M(T) \propto (T - T_C)^b$$

Modelo de Ising 2D: $b = \frac{1}{8}$

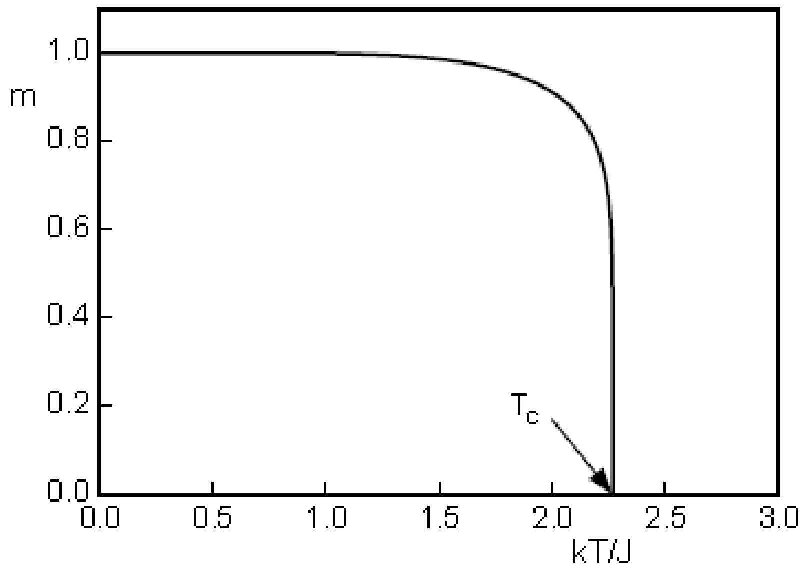
- A *"assinatura"* da transição de fase deve ocorrer quando:

$$q_1 = q_2 = 2\pi$$
$$\sinh(2\beta J) = 1$$

$$\frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2}) = 0.44069$$

$$T_c \approx 2.27 \left[{}^{J}/_{k_B}\right]$$

Modelo de Ising 2D



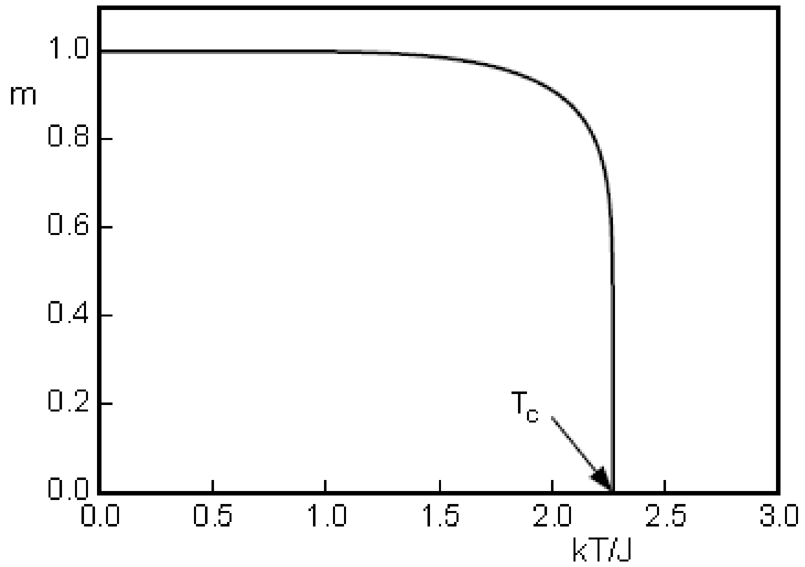
$$M(T) = \left(1 - \frac{1}{\sinh^4(2\beta J)}\right)^{1/8}$$

- Para o caso de J_1 e J_2 como as interações horizontal e vertical, respectivamente:

$$M(T) = \left(1 - \frac{1}{\sinh^2(2\beta J_1)\sinh^2(2\beta J_2)}\right)^{1/8}$$

- Podemos nos desfazemos de algumas **aproximações**:
    - J_{ij} entre segundos, terceiros, quartos... *n*-ésimos vizinhos;
    - $B_0 \neq 0 \rightarrow$ para este caso, uma solução exata **não** foi encontrada;
    - Aumentar a dimensionalidade da rede (para 3D);
    - Incluir outras interações;
    - Tratar S_i^z como operadores de *spin*.

Modelo de Ising 2D



$$M(T) = \left(1 - \frac{1}{\sinh^4(2\beta J)}\right)^{1/8}$$

O modelo de Ising bidimensional *apresenta* uma transição de fase à temperatura finita (magnetização espontânea em $T < T_c$)

- Podemos nos desfazemos de algumas **aproximações**:

  - J_{ij} entre segundos, terceiros, quartos... *n*-ésimos vizinhos;
  - $B_0 \neq 0 \rightarrow$ para este caso, uma solução exata **não** foi encontrada;
  - Aumentar a dimensionalidade da rede (para 3D);
  - Incluir outras interações;
  - Tratar S_i^z como operadores de *spin*.

Expoentes Críticos: Modelos

$T_c? \implies M$ **(espontânea)**

Modelo de Ising 3D? Em aberto.

Modelo de Ising 1D NÃO

Modelo de Ising 2D SIM $\implies \dfrac{J}{k_B T_c} = \dfrac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2}) = 0.44069$

	α	β	γ	δ	ν
Landau theory	0	1/2	1	3	1/2
2*d*-Ising model	0	1/8	7/4	15	1
3*d*-Ising model	0.11	0.325	1.24	4.816	0.63
XY-model	−0.008	0.345	1.316	4.81	0.67
3*d*-Heisenberg model	−0.116	0.365	1.387	4.803	0.705
spherical model	−1	1/2	2	5	1

M. Getzlaff, Fundamentals of Magnetism, Springer, 2007

Modelo de Ising: NP-completo

from *SIAM News*, Volume 33, Number 6

The Ising Model Is NP-Complete

By Barry A. Cipra

Enormous herds of naked souls I saw,
lamenting till their eyes were burned of tears;
they seemed condemned by an unequal law,

for some were stretched supine upon the ground,
some squatted with their arms about themselves,
and others without pause roamed round and round.
—*The Inferno, Canto XIV* (Ciardi translation)

In 1925, the German physicist Ernst Ising introduced a simple mathematical model of phase transitions, the abrupt changes of state that occur, for example, when water freezes or a cooling lump of iron becomes magnetic. In the 75 years since, the Ising model has been analyzed, generalized, and computerized—but never, except in special cases, solved. Researchers managed to get exact answers for physically unrealistic, two-dimensional systems, but have never been able to make the leap out of the plane.

There could be a good reason: The Ising model, in its full, nonplanar glory, is NP-complete.

The complexity result was announced in May by Sorin Istrail, a theoretical computer scientist at Sandia National Laboratories (who subsequently joined Celera Genomics in Rockville, Maryland). Extending earlier work of Francisco Barahona of the University of Chile, Istrail showed that essentially all versions of the Ising model are computationally intractable when the setting is three-dimensional.

Moreover, the new results show that the computational barrier lies not so much in the extra dimension as in the nonplanarity of an essential underlying graph—which explains why physicists have been stymied even in certain two-dimensional generalizations of the Ising model. Although it doesn't completely put the kibosh on the search for exact solutions (for one thing, the P-versus-NP question is still famously open), Istrail's work sheds new light on the likely limitations of techniques that, because of their success in the plane, had theorists chasing wild geese into the third dimension.

Ground States

I turned like one who cannot wait to see
the thing he dreads, and who, in sudden fright,
runs while he looks, his curiosity

Skyrmions (1960)

- **Algumas propriedades:**
  - São **topologicamente estáveis** (“*protected*”);
  - Definem um **ordenamento não-trivial** do espaço real (ou no espaço de momentos) – embora seja **trivial** no infinito (estruturas finitas);
  - Apresentam **propriedades de partícula** (“*particle-like*”);

https://en.wikipedia.org/wiki/Tony_Skyrme

- **Em matéria condensada:**
  - São definidos por uma **carga topológica** *S*:

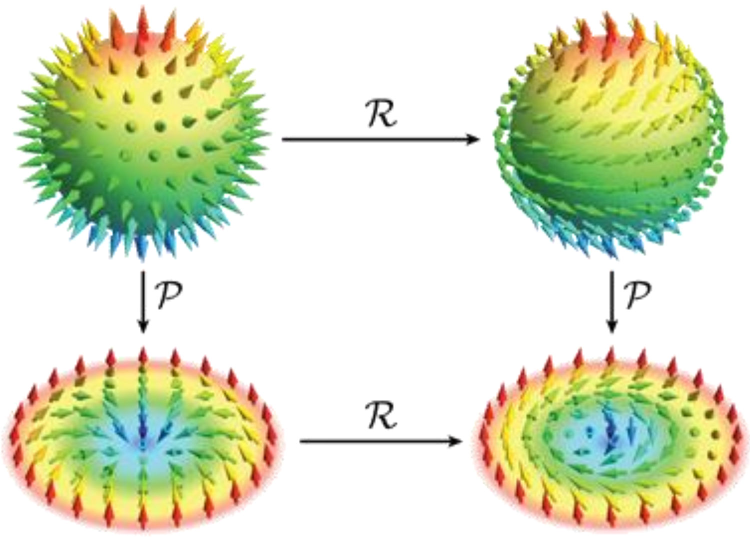
$$S = \frac{1}{4\pi}\oint_s \left(\frac{\partial \hat{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \hat{n}}{\partial y}\right)\cdot \hat{n} dS \Rightarrow \begin{cases} S = 1 \Rightarrow Skyrmion \\ S = -1 \Rightarrow \text{Anti - } Skyrmion \\ S = 0 \Rightarrow \text{Estado trivial (FM)} \end{cases}$$

Onde :

$\hat{n}$ é o vetor normalizado de magnetização

Skyrmions (1960)

- **Algumas propriedades:**
  - São **topologicamente estáveis** (*"protected"*);
  - Definem um **ordenamento não-trivial** do espaço real (ou no espaço de momentos) – embora seja **trivial** no infinito (estruturas finitas);
  - Apresentam **propriedades de partícula** (*"particle-like"*);



- **Em matéria condensada:**
  - São definidos por uma **carga topológica** *S*:

$$S = \frac{1}{4\pi}\oint_s \left(\frac{\partial \hat{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \hat{n}}{\partial y}\right) \cdot \hat{n} dS \Rightarrow \begin{cases} S = 1 \Rightarrow Skyrmion \\ S = -1 \Rightarrow \text{Anti-}Skyrmion \\ S = 0 \Rightarrow \text{Estado trivial (FM)} \end{cases}$$

Onde:

$\hat{n}$ é o vetor normalizado de magnetização

Skyrmions (1960)

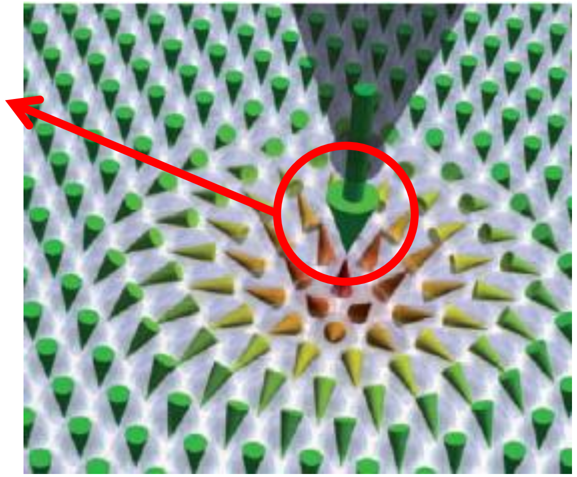
- **Algumas propriedades:**
  - São **topologicamente estáveis** (*"protected"*);
  - Definem um **ordenamento não-trivial** do espaço real (ou no espaço de momentos) – embora seja **trivial** no infinito (estruturas finitas);
  - Apresentam **propriedades de partícula** (*"particle-like"*);
- **Em matéria condensada:**
  - São definidos por uma **carga topológica** *S*:

$$S = \frac{1}{4\pi}\oint_S \left(\frac{\partial \hat{n}}{\partial x}\times\frac{\partial \hat{n}}{\partial y}\right)\cdot \hat{n}dS \Rightarrow \begin{cases} S = 1 \Rightarrow Skyrmion \\ S = -1 \Rightarrow \text{Anti-}Skyrmion \\ S = 0 \Rightarrow \text{Estado trivial (FM)} \end{cases}$$

Onde:

$\hat{n}$ é o vetor normalizado de magnetização

Ponta SP



[a]N. Romming *et al.*, Science 341, 636 (2013)

Evidência experimental de criação e aniquilação dessas cargas topológicas com a aplicação de corrente local[a]

Conclusão

O **Magnetismo Quântico** apresenta uma rica variedade de propriedades físicas emergentes e complexas, e é um efeito de muitos corpos.

More Is Different

Broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of science.

P. W. Anderson

The Theory of Everything

R. B. Laughlin* and David Pines†‡§

We discuss recent developments in our understanding of matter, broadly construed, and their implications for contemporary research in fundamental physics.

Obrigado!