

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

Ivan de Paula Miranda

## 1 Introdução

Apesar de amplamente conhecidos desde a antiguidade, os fenômenos magnéticos são, ainda hoje, objetos de intensa pesquisa. Isso se deve, principalmente, ao interesse tecnológico associado à indústria de gravação magnética, que desempenhou um papel decisivo no desenvolvimento dos computadores em geral, além de aparelhos de áudio e vídeo [1]. Neste contexto, o princípio fundamental do armazenamento de dados é que a informação pode ser decomposta em *unidades binárias* (ou *bits*), e o controle da criação ou aniquilação dos *bits* em um meio magnético depende, direta ou indiretamente, da utilização de materiais que apresentam magnetização espontânea – qualificados como **ferromagnéticos**. A existência desta características em sólidos, ligas ou estruturas de menor dimensão (monocamadas e aglomerados) está relacionada, necessariamente, à presença de efeitos microscópicos na amostra. De fato, o ferromagnetismo de sistemas metálicos, em especial os que incluem metais de transição, está sujeito a uma dualidade aparente no comportamento dos elétrons da camada  $d$  [2]. Por um lado, a natureza itinerante do estado fundamental desses elétrons pode ser descrita pela teoria de bandas [3]; de outro, em temperaturas finitas, os mesmos portadores de carga apresentam propriedades inicialmente atribuídas apenas à sistemas com momento magnético localizado.

A magnetização espontânea é um exemplo claro de **parâmetro de ordem**, cujo aspecto fundamental é a existência de uma temperatura crítica ( $T_C$ ), responsável pela separação de duas fases do sistema: ordenada e desordenada. No caso do ferromagnetismo, para temperaturas acima de  $T_C$  a magnetização torna-se nula, enquanto, para temperaturas abaixo deste valor, ela é caracterizada por uma quantidade não-nula. O conceito de parâmetro de ordem, introduzido por Landau, estabelece uma nova variável termodinâmica necessária para a descrição da fase ordenada. Cabe ressaltar que a transição ferromagnética é acompanhada por uma quebra de simetria de reversão temporal **espontânea**, forçada naturalmente por uma questão de minimização de energia. No estado não-magnético (fase desordenada), os *spins* se orientam em direções aleatórias, o que produz uma magnetização líquida nula na amostra. Por outro lado, como veremos mais adiante (na **Eq. 1**), o alinhamento dos *spins*, mediado pela interação existente entre eles, pode provocar o efeito macroscópico de magnetização não-nula.

A teoria moderna do magnetismo, concomitante com o advento da Mecânica Quântica, atingiu recentemente um progresso considerável no esclarecimento dos comportamentos como os descritos nos parágrafos anteriores, que estão na *gênese* dos efeitos magnéticos. Entretanto, os modelos atualmente disponíveis não são capazes de dar suporte teórico a todos os fenômenos, magnéticos ou deles derivados, verificados pela experiência. Tampouco nos permite o domínio racional completo sobre os possíveis novos materiais. A combinação de elementos com ocupações eletrônicas de valência e números atômicos distintos – que definem, por exemplo, a relevância dos efeitos relativísticos, e, conseqüentemente, do acoplamento *spin-órbita* [4] –, organizados em arranjos com diferentes números de coordenação e tipos de vizinhança, dá origem a fenômenos não observáveis em escala macroscópica, tais como: a formação de *skyrmions* [5–7], frustrações magnéticas [8], efeitos de paridade [9, 10], e interações de longo alcance do tipo Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) [11–14]. Além disso, o magnetismo em sistemas

fortemente correlacionados (e.g. supercondutores [15]) não é bem entendido. Mesmo assim, o seu forte emaranhamento com a estrutura eletrônica e efeitos de correlação nestes materiais, emergentes das interações em um sistema de muitos corpos, torna-o um dos ramos mais interessantes e desafiadores da Física do Estado Sólido. No presente trabalho, nos concentramos na apresentação das soluções do modelo de Ising em 1D e 2D, as mais simples e usuais aproximações da hipótese de Heisenberg para o magnetismo, baseada nas interações entre *spins*. O artigo está organizado da seguinte maneira: na **Seção 2**, abordamos uma perspectiva histórica das teorias elaboradas até a década de 20, entre elas as teorias de Weiss, Heitler-London, e de Heisenberg; por sua vez, na **Seção 3**, realizamos uma rápida introdução do modelo de Ising, e, logo em seguida, as soluções explícitas dos casos uni e bidimensional; por fim, na **Seção 4**, expomos nossas considerações finais.

## 2 Ferromagnetismo no início do século XX

A primeira tentativa de explicar o fenômeno da magnetização espontânea foi proposta por Pierre Weiss [16] em 1907. Weiss postulou a existência de um campo magnético interno ao sólido, denominado *campo molecular*, constituído de um campo médio efetivo originário das interações entre os momentos magnéticos atômicos ( $\boldsymbol{\mu}$ ) presentes no meio. A relação matemática para o campo molecular ( $\mathbf{B}_m$ ) pode ser escrita como:  $\mathbf{B}_m = \lambda_m n \langle \mu_J^z \rangle_T \mathbf{k}$ , onde  $n$  é o número de átomos por unidade de volume;  $\langle \mu_J^z \rangle_T$  representa a média do momento  $\boldsymbol{\mu}$  na direção  $z$  e à temperatura finita  $T$ , associada ao número quântico  $J$ ; e  $\lambda_m$  é uma constante de proporcionalidade. Utilizando-se da definição da média térmica dentro da Mecânica Estatística clássica para calcular  $\langle \mu_J^z \rangle_T$ , e impondo a condição de  $\langle \mu_J^z \rangle_T = 0$  para  $T = T_C$ , o modelo de Weiss foi pioneiro no cálculo analítico de uma temperatura crítica para a magnetização a campo externo nulo (temperatura de Curie), abaixo da qual ocorre o ferromagnetismo. A teoria clássica elaborada por Weiss desempenhou um papel fundamental no desenvolvimento dos modelos posteriores, essencialmente ao introduzir a ideia de um *alinhamento* entre os momentos magnéticos. Ademais, apesar de sua formulação anterior ao surgimento da Mecânica Quântica, o modelo assumia níveis discretos de energia que se relacionavam aos respectivos valores de momentos magnéticos.

Em 1927, Heitler e London [17] publicaram um cálculo quântico para a molécula de  $\text{H}_2$  (par eletrônico), no qual mostraram a interação de troca,  $\mathcal{J}$ , como consequência direta da necessidade de antissimetria da função de onda molecular. Esta quantidade depende de ambas as funções de onda dos elétrons no sistema (*overlap*), caracterizando-se como uma interação de curto alcance. A integral de troca na molécula de hidrogênio decai exponencialmente com o aumento da distância entre os núcleos, diferentemente da interação coulombiana, que decresce com  $\frac{1}{r^2}$ , mais devagar. Assim, o estado fundamental de  $\text{H}_2$  pode ser representado tanto por um estado *singlete* quanto por um *triplete*, dependendo do sinal da integral  $\mathcal{J}$ . No primeiro caso, é energeticamente favorável que os *spins* sejam alinhados antiparalelos ( $\mathcal{J} > 0$ ), enquanto no segundo caso os *spins* eletrônicos alinham-se paralelamente ( $\mathcal{J} < 0$ ). Por sua vez, Heisenberg [18], em 1928, propôs um modelo fenomenológico baseado nos resultados de Heitler e London. É importante destacar que Heisenberg concebeu inicialmente o modelo para isolantes magnéticos, embora seja perfeitamente aplicável para materiais magnéticos com momentos localizados [19]. No modelo, a interação entre os *spins* eletrônicos leva ao ordenamento espontâneo. Dessa maneira, de acordo com a referência [18], o **magnetismo** derivava exclusivamente das interações elétron-elétron no material, sem se importar com a influência dos núcleos. E mais ainda: baseava-se no caráter quântico dessas interações. Ao contrário da molécula de hidrogênio, nos ferromagnetos (Fe, Co, Ni) o estado com maior *spin* total é o de menor energia, e, portanto, no estado fundamental todos os *spins* eletrônicos tendem a se ordenar paralelamente. Esta explicação para a natureza do ferromagnetismo é também atribuída a Frenkel [20] e Dorfman [21]. O modelo de Heisenberg proporcionou uma interpretação física do **porquê**, na teoria de Weiss, os momentos magnéticos estariam alinhados *a priori* em um ferromagneto – embora os *spins*, nesta teoria, sejam tratados

como observáveis quânticos. Por outro lado, ilustrou a situação de um material não-magnético como consequência de uma distribuição desorganizada (ou aleatória) dos *spins*. A Hamiltoniana resultante do modelo de Heisenberg ( $\mathcal{H}$ ) pode ser definida como se segue:

$$\mathcal{H} = - \sum_{l,n} \mathcal{J}_{ln} \mathbf{s}_l \cdot \mathbf{s}_{l+n} - g_j \mu_B B_{\text{ext}} \sum_l s_l^z \quad (1)$$

na qual  $\mathbf{s}_i$  representa o operador de *spin* total no sítio  $i$ , de tal maneira que o produto escalar  $\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = \frac{1}{2} (s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+) + s_i^z s_j^z$  pode ser expresso em termos dos operadores de escada  $s^\pm = (s^x \pm i s^y)$ ;  $g_j$  é o fator de Landé;  $B_{\text{ext}}$  simboliza a magnitude do campo magnético externo aplicado ao longo do eixo  $z$ ; e, finalmente,  $\{s^x, s^y, s^z\}$  são as componentes de  $\mathbf{s}$  nos eixos  $x$ ,  $y$ , e  $z$ , respectivamente. Em termos gerais, a interação entre os *spins*, mediada pela integral de troca  $\mathcal{J}_{nl}$ , é descrita pelo primeiro termo, ao passo que o segundo termo representa a interação dos *spins* locais com um eventual campo magnético externo. A obtenção da **Eq. 1** representou um importante passo para a caracterização, mesmo que qualitativa, de sistemas que apresentavam magnetização líquida sob determinadas condições. O ordenamento magnético, portanto, estava sempre sujeito a uma competição com a temperatura: quanto maior fosse a energia térmica para uma mesmo parâmetro de troca  $\mathcal{J}$ , até certo valor crítico, o alinhamento entre os *spins* tornava-se menos efetivo e mais custoso, diminuindo os efeitos de magnetização espontânea no sistema. Claramente, a Hamiltoniana microscópica de Heisenberg (**Eq. 1**) – apesar de explícita, e, em tese, suficiente para descrever o comportamento magnético de um sistema de muitos corpos – não tem solução trivial. A razão é simples: em uma estrutura volumétrica (*bulk*)<sup>1</sup> há sempre um número muito grande de constituintes ( $N \rightarrow \infty$ ), e, associado a cada um deles, uma nuvem de elétrons complexa, em alguns casos localizada, em outros espacialmente extensas devido às hibridizações com o meio. Deste modo, o tratamento individual das interações entre os *spins* eletrônicos na Hamiltoniana microscópica torna-se difícil de lidar nos casos mais gerais. A fim de superar este impasse, convém supor que o mesmo cenário físico do problema pode ser obtido com a substituição da Hamiltoniana microscópica pela Hamiltoniana de *exchange*, que considera as interações entre os *spins* **atômicos**, ou, simplesmente  $\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{S}$  [22]<sup>2</sup> – escrita equivalentemente à **Eq. 1**. A consideração dos *spins* atômicos no modelo deixa-o mais próximo do esboço elaborado por Weiss, no qual o campo molecular originava-se das interações entre os momentos magnéticos dos átomos. Embora a substituição  $\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{S}$  facilite de forma considerável a resolução da Hamiltoniana, ainda o elevado número de sítios atômicos não equivalentes no sólido cristalino (isto é, com interações assimétricas entre *spins*), acrescido do fato de existir um *operador* relacionado a cada sítio, impede a demonstração de uma solução única e geral deste modelo.

Diante das dificuldades em se resolver a Hamiltoniana de *exchange* para um sistema real, diversas aproximações surgiram ao longo do tempo. Uma delas é a chamada solução de **campo médio**. Uma vez que o produto de operadores de *spin* não é fácil de tratar para além das interações entre primeiros vizinhos, os termos em pares ( $\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+n}$ ) da Hamiltoniana podem ser condensados na interação de um único *spin*  $\mathbf{S}_l$  com o campo (*médio*) efetivo produzido por sua vizinhança. Além disso, também é conveniente supor que a integral de troca é isotrópica e apenas diferente de zero para os primeiros vizinhos. Isto porque frequentemente os valores de  $\mathcal{J}$  extinguem-se em longas distâncias; veja, por exemplo, os parâmetros de troca calculados, via métodos *ab initio*, para o Ni (FCC) e Co (FCC) na referência [23]. Portanto, equivale a escrever:

$$\mathcal{J}_{ln} = \begin{cases} \mathcal{J}_0, & \text{se } l \text{ e } n \text{ são sítios da primeira vizinhança} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2)$$

<sup>1</sup>A investigação das propriedades magnéticas dos materiais foi, originalmente, voltada para sistemas *bulk*.

<sup>2</sup>Também podemos pensar nessa transformação como um acoplamento entre os *spins* dos diferentes elétrons “internos” aos átomos, formando seu *spin* total  $\mathbf{S}$ . Perceba que a notação  $\mathbf{s}$  (minúscula), no texto, refere-se ao operador de *spin* associado ao elétron.

Sem perda de generalidade, o operador de *spin*  $\mathbf{S}_k$  genérico pode ser substituído pela soma de seu valor médio ( $\langle \mathbf{S}_k \rangle$ ) com os desvios (ou flutuações) a ele associados, dados por  $(\mathbf{S}_k - \langle \mathbf{S}_k \rangle)$ . Ou, simplesmente:  $\mathbf{S}_k = \langle \mathbf{S}_k \rangle + (\mathbf{S}_k - \langle \mathbf{S}_k \rangle)$ . Colocando esta expansão, ainda exata, na Hamiltoniana de *exchange* com  $B_{\text{ext}} = 0$ , e levando em conta a hipótese da **Eq. 2**, ficamos com:

$$\mathcal{H}_{CM} = -2\mathcal{J}_0 \sum_l \mathbf{S}_l \cdot \left[ \sum_n \langle \mathbf{S}_{l+n} \rangle \right] - \mathcal{J}_0 \sum_{n \neq 0} \langle \mathbf{S}_l \rangle \cdot \langle \mathbf{S}_{l+n} \rangle = -2\mathcal{J}_0 \sum_l \mathbf{S}_l \cdot \left[ \sum_n \langle \mathbf{S}_{l+n} \rangle \right] + \text{cte.} \quad (3)$$

Para o primeiro termo da **Eq. 3**, podemos definir o momento magnético  $\mathbf{m} = 2\mathcal{J}_0 \sum_n \langle \mathbf{S}_{l+n} \rangle = 2p\mathcal{J}_0 \langle \mathbf{S}_{l+n} \rangle$  resultante da interação entre os *spins* atômicos dos primeiros  $p$  vizinhos do sítio  $l$ . Então, a Hamiltoniana de *exchange* de campo médio ( $\mathcal{H}_{CM}$ ), a menos de uma constante, é naturalmente reescrita como  $\mathcal{H}_{CM} = \sum_l \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{m}$ , diagonal no índice  $l$  e, portanto, solucionável de modo imediato. Supondo, por simplicidade, que todos os íons do material tenham *spin*  $S = \frac{1}{2}$  e que o momento magnético  $\mathbf{m}$  orienta-se na direção  $z$  ( $\mathbf{m} = m\mathbf{k}$ ), a função de partição  $Z_{CM}$  associada à Hamiltoniana de campo médio será:

$$Z_{CM} = \sum_i e^{-\beta E_i} = \left( e^{\frac{\beta m}{2}} + e^{-\frac{\beta m}{2}} \right)^N; \text{ com } \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (4)$$

onde  $m = |\mathbf{m}|$ ,  $N$  representa a quantidade de sítios considerados no problema, e lembrando que os autovalores permitidos das projeções de  $\mathbf{S}$  no eixo  $z$  são  $S_z = \pm \frac{1}{2}$ . Assim, com a forma explícita da função de partição (**Eq. 4**), as propriedades termodinâmicas do sistema podem ser facilmente obtidas. Na verdade, à medida que a hipótese do campo médio transforma o modelo de Heisenberg em um modelo de Weiss por construção, a solução do problema também é dada por uma função de Brillouin [4].

## 3 O modelo de Ising

### 3.1 Preâmbulo

Outra aproximação para a teoria microscópica de Heisenberg é o chamado modelo de Ising [24]<sup>3</sup>. Até o presente momento, este é o único modelo **clássico** *quase*-realista de um sistema de muitos corpos – e que apresenta transição de fase – rigorosamente resolvido para as dimensões  $D = 1$  e  $D = 2^4$ . Por volta de 1920, o físico alemão Wilhelm Lenz propôs ao seu aluno Ernst Ising um problema estatístico baseado nas interações entre *spins*, que foi resolvido exatamente para o caso unidimensional. Lenz concebeu originalmente esta ideia para o estudo de fenômenos magnéticos em materiais isolantes. Como veremos na **Seção 3.2**, adiante, Ising demonstrou que o problema em 1D *não* manifesta uma transição de fase a temperatura finita, o que foi, de certa forma, decepcionante para ele na época. Ademais, somou-se a isso o fato de não se ter conseguido resolver de imediato o modelo para duas ou três dimensões. Este problema ficou em aberto até a solução exata de Onsager [26] na década de 40, embora Peierls [27] tenha demonstrado, alguns anos antes da publicação de [26], que a magnetização espontânea surgia naturalmente no caso bidimensional, sem atingir, entretanto, sua solução de fato.

No modelo de Ising, o operador de *spin*  $\mathbf{S}$  é tomado como unidimensional e apresenta apenas dois estados possíveis: o *spin up* ( $\uparrow$ ), que assume o valor  $+1$ , e o *spin down* ( $\downarrow$ ), de valor  $-1$ . Trata-se de uma hipótese elaborada para sistemas de *spins* com uma direção privilegiada,

<sup>3</sup>Note que a data de publicação (1925) é anterior à atribuída para o modelo de Heisenberg (1928). Assim, a rigor, Lenz não propôs um modelo *baseado* na interpretação de Heisenberg para o magnetismo, mas concomitantemente definiu um Hamiltoniano estatístico fundamentalmente na existência das interações entre *spins*.

<sup>4</sup>A solução analítica para  $D = 3$  talvez seja possível, no entanto ainda não é conhecida. A partir de simulações Monte Carlo, sabe-se que o **expoente crítico** para a magnetização de saturação ( $M_s \propto |T_C - T|^\beta$ ,  $T < T_C$ ) no caso tridimensional do modelo de Ising é  $\beta \approx 0,325$  [25].

existente, por exemplo, em determinado material *bulk* com elevada anisotropia cristalina axial. Ou seja, na função Hamiltoniana que define o modelo, o produto escalar do primeiro termo da **Eq. 1** é substituído por uma simples multiplicação de valores  $S_k = \pm 1$  de *spin* associados aos sítios genéricos  $k$ . Em adição, a hipótese da direção privilegiada dos *spins* (e.g. paralela ao eixo  $z$ ) extingue os termos do tipo  $S_i^x S_j^x$  e  $S_i^y S_j^y$ , resultantes do desenvolvimento do produto interno, pois assume-se que estes são desprezíveis em comparação a  $S_i^z S_j^z$ . Consequentemente, a notação  $z$  em  $S_i^z$  torna-se um “índice mudo”, que, portanto, pode ser descartado. Enfim, a Hamiltoniana que caracteriza o modelo de Ising pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_{IS} = - \sum_{l,n} \mathcal{J}_{ln} S_l S_{l+n} - g_j \mu_B B_{\text{ext}} \sum_l S_l \quad (5)$$

bastante semelhante à **Eq. 1**. Esta é a aproximação mais simples que pode ser feita do modelo de Heisenberg, preservando suas características gerais. Embora se conheça atualmente uma solução *exata* para a **Eq. 5** em 1D com campo magnético externo aplicado ( $B_{\text{ext}} \neq 0$ ), centralizaremos aqui as explicações para a condição  $B_{\text{ext}} = 0$ , justamente visando procurar alguma magnetização espontânea no modelo, decorrente da interação pura entre os sítios binários. Além disso, para fins de simplificação, a hipótese da **Eq. 2** será utilizada nas seções seguintes.

As possíveis aplicações para o modelo definido pela **Eq. 5** são amplas. Entre elas, podemos citar: a construção teórica de isolantes magnéticos (em particular, aqueles cujos momentos apresentam forte simetria uniaxial, tal como o  $\text{DyPO}_4$  e o  $\text{CoCs}_3\text{Cl}$  [19]); a utilização para demonstração e investigação, em Mecânica Estatística, de sistemas que apresentam transição de fase; o estudo de ligas binárias, para as quais é estabelecida a correspondência entre os estados  $S_k$  de *spin* e os dois sítios com diferentes espécies atômicas, ao passo que o valor de  $\mathcal{J}_{ln}$  substitui a interação entre estes átomos; a utilização como modelo para materiais ferroelétricos; entre outras. Perante a vasta gama de aplicações, intensos esforços foram direcionados no sentido de se obter a solução exata do caso tridimensional, particularmente seguindo o *ansatz* de Onsager, mas todos resultaram em tentativas frustradas. Assim, o modelo de Ising em 3D continua um problema em aberto. Apesar de sua extensa difusão, poucos trabalhos em língua portuguesa, até o nosso melhor conhecimento, reproduziram a solução analítica para o caso bidimensional de Onsager.

### 3.2 Solução do caso unidimensional

Considere uma cadeia linear finita contendo  $N$  *spins localizados* submetida a campo magnético externo nulo. Adotando a isotropia das interações de troca como um princípio geral (isto é, cada *spin* admite unicamente interações com seu(s) primeiro(s) vizinho(s), de intensidade  $\mathcal{J}_0$ ), a função Hamiltoniana que representa este sistema, elaborada a partir da **Eq. 5**, é:  $\mathcal{H} = -\mathcal{J}_0 \sum_{l=1}^{N-1} S_l S_{l+1}$ , onde as variáveis genéricas  $S_k$  assumem os valores  $\pm 1$ . A **Fig. 1**, abaixo, ilustra uma possível configuração para o arranjo linear de *spins*. Como cada sítio tem 2 estados permitidos, inevitavelmente existem  $2^N$  ordenamentos diferentes de *spins* admitidos para toda a cadeia. A função canônica de partição associada a este sistema ( $Z_N$ ) é obtida a partir dos seus estados microscópicos, em semelhança ao caso clássico de um sistema de partículas com dois níveis de energia. A expressão final de  $Z_N$ , portanto, fica ( $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ):

$$Z_N = Z_N(\mathcal{J}_0) = \sum_{\{S_1\}} \sum_{\{S_2\}} \dots \sum_{\{S_N\}} \exp \left( \beta \mathcal{J}_0 \sum_{l=1}^{N-1} S_l S_{l+1} \right) \quad (6)$$

na qual  $\{S_k\}$  simboliza o conjunto de estados  $S_k = \pm 1$  que caracteriza cada sítio genérico  $k$ . A solução mais simples do caso unidimensional é obtida por meio da **relação de recursão** vinculada à **Eq. 6**. Ao adicionarmos um *spin* extra na cadeia – de forma que o total de sítios passa a ser  $N + 1$  –, a nova função de partição  $Z_{N+1}$  do arranjo linear será:

$$\begin{aligned}
Z_{N+1} = Z_{N+1}(\mathcal{J}_0) &= \sum_{\{S_1\}} \sum_{\{S_2\}} \dots \sum_{\{S_N\}} \exp\left(\beta \mathcal{J}_0 \sum_{l=1}^{N-1} S_l S_{l+1}\right) \sum_{\{S_{N+1}\}} \exp(\beta \mathcal{J}_0 S_N S_{N+1}) \\
&= Z_N \sum_{\{S_{N+1}\}} \exp(\beta \mathcal{J}_0 S_N S_{N+1})
\end{aligned} \tag{7}$$

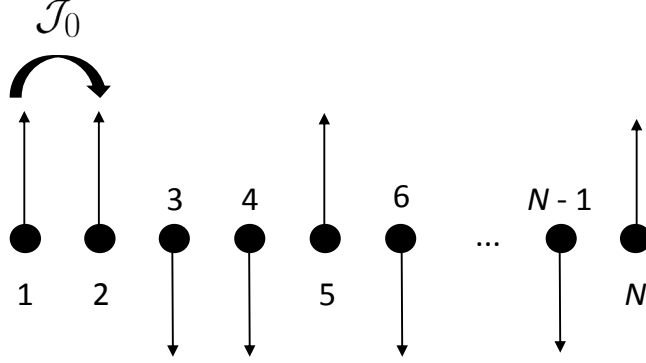


Figura 1: Representação esquemática de uma configuração possível para uma cadeia contendo  $N$  spins. A magnitude da interação é dada por  $\mathcal{J}_0$ .

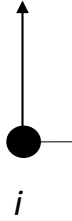


Figura 2: Sítio único com  $spin S_i = +1$ . Note que não há interação.

Por construção,  $\sum_{\{S_{N+1}\}} \exp(\beta \mathcal{J}_0 S_N S_{N+1}) = e^{\beta \mathcal{J}_0 S_N} + e^{-\beta \mathcal{J}_0 S_N} = 2 \cosh(\beta \mathcal{J}_0 S_N) = 2 \cosh(\beta \mathcal{J}_0)$ , dado que a função  $\cosh(x)$  é par – logo, não depende do *signal* do argumento. Dessa maneira, podemos produzir, partindo da **Eq. 7**, a relação de recursão  $Z_{N+1} = 2Z_N \cosh(\beta \mathcal{J}_0)$ . Se  $Z_1$  é a função de partição associada a um único *spin* (*ensemble* microcanônico), então, utilizando o primeiro postulada da Mecânica Estatística, o qual estabelece que todos os estados microscópicos de um sistema fechado, com energia fixa, são igualmente prováveis, é claro que  $Z_1 = \sum_{\{S_i\}} e^0 = 2$ . O expoente zero se deve ao fato de a energia no modelo de Ising estar relacionada à interação entre **pares** de spins, de forma que, para um sítio único (veja a **Fig. 2**), ela é necessariamente nula por definição. A relação de recursão entre  $Z_{N+1}$  e  $Z_N$  nos permite desmembrar a cadeia de spins em um conjunto de sítios únicos com energia nula de interação, ou:  $Z_{N+1} = 2Z_N \cosh(\beta \mathcal{J}_0) = 2^2 Z_{N-1} \cosh^2(\beta \mathcal{J}_0) = \dots = 2^N Z_1 \cosh^N(\beta \mathcal{J}_0) = 2^{N+1} \cosh^N(\beta \mathcal{J}_0)$ . Sem perda de generalidade, voltando para o caso de um arranjo linear com  $N$  spins:

$$Z_N = 2^N \cosh^{N-1}(\beta \mathcal{J}_0) \tag{8}$$

A **Eq. 8** é bastante útil na determinação da existência ou não de magnetização espontânea no caso unidimensional, pois estabelece a relação direta entre a Hamiltoniana de Ising e as

propriedades termodinâmicas do sistema. Por exemplo, a partir de  $Z_N$ , é possível encontrar a **função de correlação** entre os *spins*. Neste sentido, é vantajoso generalizar o modelo de Ising e assumir que a magnitude da interação entre cada um dos vizinhos mais próximos e o sítio de referência é arbitrária, o que equivale supor  $\mathcal{J}_0 \rightarrow \mathcal{J}_l$ . Assim, a nova Hamiltoniana para a cadeia de  $N$  *spins* é  $\mathcal{H} = -\sum_{l=1}^{N-1} \mathcal{J}_l S_l S_{l+1}$ , que, analogamente à demonstração anterior, leva à função de partição  $Z_N = 2^N \prod_{l=1}^{N-1} \cosh(\beta \mathcal{J}_l)$ . Portanto, a correlação entre *spins* vizinhos  $S_n$  e  $S_{n+1}$ ,  $\langle S_n S_{n+1} \rangle$ , é dada por:

$$\begin{aligned} \langle S_n S_{n+1} \rangle &= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{S_1\}} \sum_{\{S_2\}} \cdots \sum_{\{S_N\}} S_n S_{n+1} \exp\left(\sum_{l=1}^{N-1} \beta \mathcal{J}_l S_l S_{l+1}\right) \\ &= \frac{1}{Z_N} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_n} \sum_{\{S_1\}} \sum_{\{S_2\}} \cdots \sum_{\{S_N\}} \exp\left(\sum_{l=1}^{N-1} \beta \mathcal{J}_l S_l S_{l+1}\right) \\ &= \frac{1}{Z_N} \frac{1}{\beta} \frac{\partial Z_N(\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \dots, \mathcal{J}_{N-1})}{\partial \mathcal{J}_n} \\ &= \frac{2^N \cosh(\beta \mathcal{J}_1) \cosh(\beta \mathcal{J}_2) \cdots \sinh(\beta \mathcal{J}_n) \cdots \cosh(\beta \mathcal{J}_{N-1})}{2^N \cosh(\beta \mathcal{J}_1) \cdots \cosh(\beta \mathcal{J}_n) \cdots \cosh(\beta \mathcal{J}_{N-1})} = \tanh(\beta \mathcal{J}_n) = \tanh(\beta \mathcal{J}_0) \end{aligned} \quad (9)$$

Observe que, na última igualdade, retomamos a hipótese da **Eq. 2**. Similarmente, se desejamos calcular a função de correlação entre *spins* pertencentes à  $m$ -ésima vizinhança  $S_n$  e  $S_{n+m}$  na rede linear,  $\langle S_n S_{n+m} \rangle$ , devemos lembrar que, como as variáveis genéricas  $S_k$  assumem apenas os valores  $\pm 1$  no modelo, então  $S_k^2 = 1$ . Dessa maneira, remetendo à terceira e quarta linhas da **Eq. 9**,  $\langle S_n S_{n+m} \rangle = \frac{1}{Z_N} \frac{1}{\beta^m} \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_n} \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_{n+1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_{n+m-1}} Z_N = \tanh(\beta \mathcal{J}_n) \tanh(\beta \mathcal{J}_{n+1}) \cdots \tanh(\beta \mathcal{J}_{n+m-1}) = \prod_{r=1}^m \tanh(\beta \mathcal{J}_{n+r-1})$ . Se, novamente,  $\mathcal{J}_l \rightarrow \mathcal{J}_0$  para todo sítio  $l$ , então:

$$\langle S_n S_{n+m} \rangle = \tanh^m(\beta \mathcal{J}_0) \quad (10)$$

Com a **Eq. 10**, podemos enfim responder se há magnetização espontânea no modelo de Ising em 1D. Convém utilizar o fato físico que *spins* suficientemente distantes um do outro não se “enxergam”, isto é, a interação proposta pela **Eq. 1** decai de maneira drástica (a zero) com a separação entre os sítios devido à hipótese formalizada pela **Eq. 2**. Logo, no limite termodinâmico ( $m \rightarrow \infty$ ), temos  $\langle S_n S_{n+m} \rangle \rightarrow \langle S_n \rangle \langle S_m \rangle$ , e, como consequência da simetria translacional do eixo no qual está inserida a cadeia, presume-se que o valor esperado dos *spins* seja o mesmo. Assim, como a magnetização é basicamente uma medida do *spin* total do sistema, ou seja,  $M(T) = \mu_B \langle S \rangle$ , podemos escrever o seguinte:

$$\begin{aligned} M^2(T) &= \mu_B^2 \langle S \rangle^2 = \mu_B^2 \lim_{m \rightarrow \infty} \langle S_n \rangle \langle S_m \rangle = \mu_B^2 \lim_{m \rightarrow \infty} \langle S_n S_{n+m} \rangle \\ &= \begin{cases} \mu_B^2, & \text{se } \beta = \infty \\ 0, & \text{se } 0 < \beta < \infty \end{cases} \implies M(T) = \begin{cases} \mu_B, & \text{se } T = 0 \\ 0, & \text{se } 0 < T < \infty \end{cases} \end{aligned} \quad (11)$$

O resultado mostrado na **Eq. 11** indica que modelo de Ising unidimensional apresenta uma transição de fase em  $T = 0$  K, mas não à temperatura finita – isto é, **não** há magnetização espontânea no sistema linear de *spins*, exceto no estado fundamental. A tendência ao alinhamento é sempre fraca em  $T > 0$  devido ao baixo número de primeiros vizinhos, não importando a magnitude da interação  $\mathcal{J}_0$ . A **Fig. 3**, abaixo, ilustra o diagrama de fases correspondente.

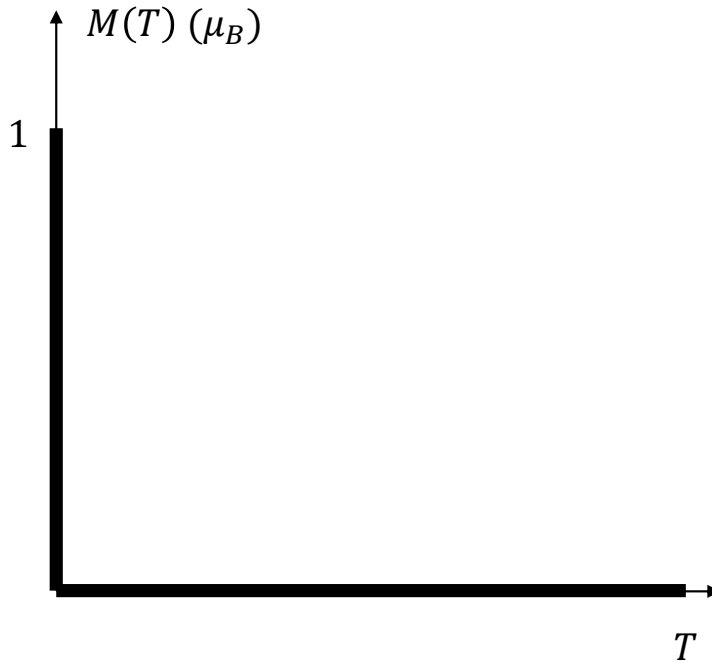


Figura 3: Diagrama de fase para o caso unidimensional do modelo de Ising.

### 3.3 Solução do caso bidimensional

A solução exata de Onsager para o modelo de Ising bidimensional baseou-se, originalmente, na utilização de **matrizes de transferência**, de tal forma que a função de partição associada ao sistema pudesse ser obtida pelo traço destas matrizes [26]. O mesmo método pode ser empregado para resolver o caso unidimensional quando  $B_{\text{ext}} \neq 0$ , resultando em matrizes  $2 \times 2$  que *transferem* a interação entre os pares de *spins*  $S_l$  e  $S_{l+1}$ , vinculada à magnitude do campo externo aplicado, tendo como estados de base os espinores  $|S = +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  e  $|S = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Trata-se, portanto, de uma abordagem bastante semelhante à utilizada na Mecânica Quântica atual. A principal diferença relacionada ao tratamento de uma rede quadrada de *spins* em comparação ao arranjo linear é que estas matrizes possuem dimensão  $2^n \times 2^n$ , onde  $n$  representa o número de sítios em cada fileira. Onsager estabeleceu dois coeficientes de troca distintos,  $\mathcal{J}_1$  e  $\mathcal{J}_2$ , relacionados às interações de um determinado sítio com seus vizinhos imediatos na vertical e na horizontal. A cada um destes diferentes tipos de interação “*diagonal-to-diagonal*”, associou uma matriz de transferência. Para a obtenção dos autovalores correspondentes, foi suficiente assumir que ambas as matrizes comutam, e que para qualquer uma delas a matriz inversa pode ser encontrada. Com a determinação dos autovalores, Onsager completou a prova derivando a energia livre de Helmholtz e o comprimento de correlação. A partir da primeira demonstração, diversas outras alternativas para o problema foram publicadas, entre elas os métodos de Schultz *et al.* [28] o de Stephen-Mittag [29].

Ao contrário do caso unidimensional, o modelo em duas dimensões apresenta uma transição de fase ferromagnética (ordenada)  $\Leftrightarrow$  paramagnética (desordenada) à temperatura finita. O cálculo explícito da magnetização,  $M(T)$ , *não* será desenvolvido na presente seção, por se tratar de uma demonstração consideravelmente extensa: passaram-se *cinco* anos entre derivação da energia livre por Onsager e o resultado analítico de  $M(T)$ . Além disso, para fins de simplificação, a própria solução do modelo de Ising bidimensional será constituída de uma versão mais acessível que a original – baseada na formulação combinatória de Glasser, da década de 1970 [30] –, sob



a hipótese de uma **rede quadrada** de *spins* com interação isotrópica.

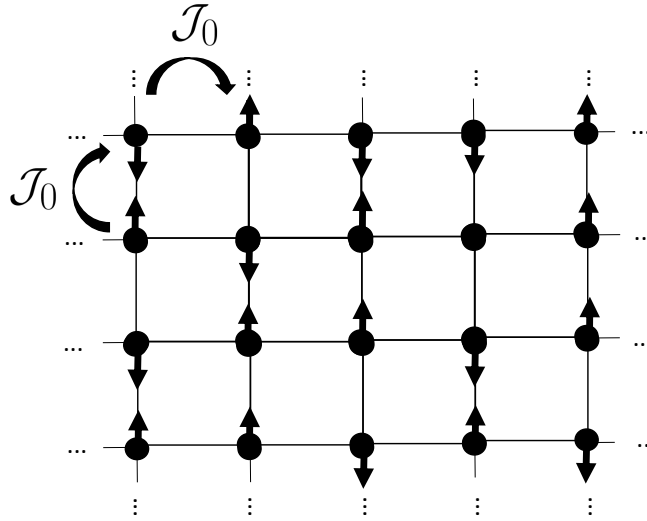


Figura 4: Representação esquemática de uma configuração possível para a rede quadrada contendo  $N = n^2$  *spins*. A magnitude da interação é dada por  $\mathcal{J}_0$ .

Considere, portanto, um sistema bidimensional de  $N = n^2$  *spins*, contendo  $n$  linhas e  $n$  colunas, submetidas à condição de que as configurações das  $(n + 1)$ -ésimas linhas e colunas sejam idênticas às verificadas para as primeiras fileiras horizontal e vertical, respectivamente (periodicidade de contorno). A **Fig. 4** representa uma possível situação do sistema. Admita também que a Hamiltoniana correspondente à rede seja equivalente à definida pela **Eq. 5**, adotando  $B_{\text{ext}} = 0$  e uma interação isotrópica apenas entre primeiros vizinhos (**Eq. 2**), de valor  $\mathcal{J}_0$ . Assim, esta Hamiltoniana pode ser escrita como:  $\mathcal{H} = -\mathcal{J}_0 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$ , na qual  $\sum_{\langle i,j \rangle}$  simboliza a soma sobre todos os **pares** de *spins*  $S_i$  e  $S_j$  na primeira vizinhança. Analogamente aos exemplos anteriores, desejamos calcular a função canônica de partição  $Z_N = \sum_{\{S_1\}} \sum_{\{S_2\}} \dots \sum_{\{S_N\}} \exp(-\beta\mathcal{H}) = \sum_{\{S\}} \exp(-\beta\mathcal{H})$  para depois determinar a energia livre de Helmholtz do sistema, definida por  $f_N = -\frac{k_B T}{N} \ln(Z_N)$ . Para isso, dado que  $S_i S_j = \pm 1$ , vamos tomar de início a expansão da função exponencial  $\exp(\beta\mathcal{J}_0 S_i S_j) = \cosh(\beta\mathcal{J}_0) + (S_i S_j) \sinh(\beta\mathcal{J}_0) = \cosh(\beta\mathcal{J}_0) (1 + v(S_i S_j))$ , onde  $v \equiv \tanh(\beta\mathcal{J}_0)$ .

Por construção, cada *spin* possui quatro vizinhos mais próximos. Assumindo que a rede é suficientemente extensa ( $N \rightarrow \infty$ ), podemos desprezar os efeitos de borda e nos certificar que existem, então,  $4N$  pares de primeiros vizinhos, dos quais  $2N$  são iguais. Assim, há  $2N$  pares de *spins* vizinhos distintos a considerar. Isto equivale dizer que para preencher totalmente uma rede quadrada infinita basta desenhar **duas** linhas, uma na vertical e outra na horizontal (de comprimento idêntico), repetidamente no espaço – ou seja, a “célula primitiva” desta rede tem o formato de um L com as arestas de mesmo tamanho. Logo, podemos escrever o seguinte:

$$\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{\{S\}} \exp \left( \beta \mathcal{J}_0 \sum_{(i,j)} S_i S_j \right) = \sum_{\{S\}} \exp(\beta \mathcal{J}_0 S_{i_1} S_{j_1}) \dots \exp(\beta \mathcal{J}_0 S_{i_{2N}} S_{j_{2N}}) \\
&= \sum_{\{S\}} [\cosh(\beta \mathcal{J}_0) (1 + v(S_{i_1} S_{j_1}))] \dots [\cosh(\beta \mathcal{J}_0) (1 + v(S_{i_{2N}} S_{j_{2N}}))] \\
&= \cosh^{2N}(\beta \mathcal{J}_0) \sum_{\{S\}} (1 + v(S_{i_1} S_{j_1})) (1 + v(S_{i_2} S_{j_2})) \dots (1 + v(S_{i_{2N}} S_{j_{2N}})) \\
&= \cosh^{2N}(\beta \mathcal{J}_0) \sum_{\{S\}} \left[ 1 + v \sum_{\nu=1}^{2N} S_{i_\nu} S_{j_\nu} + v^2 \sum_{\substack{\nu, \rho \\ \nu \neq \rho}}^{2N} (S_{i_\nu} S_{j_\nu}) (S_{i_\rho} S_{j_\rho}) + \dots \right]
\end{aligned} \tag{12}$$

Como se observa na **Eq. 12**, a função de partição depende de termos do tipo  $\sum_{\{S\}} (S_{i_\alpha} S_{j_\alpha}) \dots (S_{i_\mu} S_{j_\mu})$  (**produtos de spin**). Isto é facilmente notado quando abrimos os somatórios  $\sum_{\nu=1}^{2N} S_{i_\nu} S_{j_\nu}$ ,  $\sum_{\substack{\nu, \rho \\ \nu \neq \rho}}^{2N} (S_{i_\nu} S_{j_\nu}) (S_{i_\rho} S_{j_\rho})$ , entre outros, em somas explícitas, que ficam submetidas à condição  $\sum_{\{S\}}$ . Lembrando que cada *spin* genérico  $S_k$  assume apenas os valores  $\pm 1$ , os produtos de *spin* resultam unicamente em **dois** valores possíveis, a saber:

$$\sum_{\{S\}} (S_{i_\alpha} S_{j_\alpha}) \dots (S_{i_\mu} S_{j_\mu}) = \begin{cases} 2^N, & \text{se todos os vértices forem de ordem par} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{13}$$

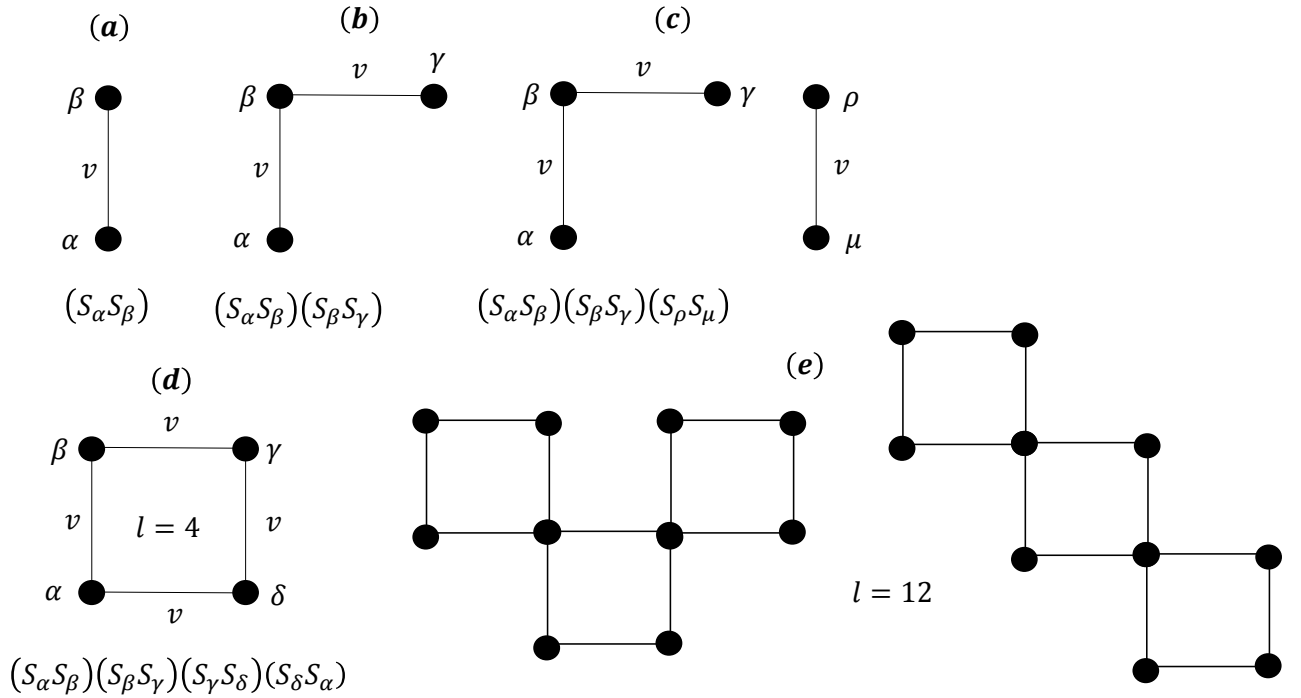


Figura 5: Ilustração de alguns produtos de *spin* existentes na rede quadrada.

A fim de justificar a **Eq. 13**, vamos introduzir a representação gráfica dos produtos de *spin* ilustrada pela **Fig. 5**. Podemos pensar nestes termos como interações entre sítios que carregam a intensidade  $v$ . Trata-se de uma abordagem muito semelhante à introduzida por Feynman

na física de partículas. Se um diagrama tem vértices de ordem ímpar (isto é, ligados a um número ímpar de sítios), a condição  $\sum_{\{S\}}$  força seu valor ser zero. Por exemplo, tomando o produto de *spin*  $\sum_{\{S\}} (S_\alpha S_\beta) (S_\beta S_\gamma)$  (**Fig. 5 (b)**), são **quatro** os valores possíveis para o termo  $(S_\alpha S_\beta) (S_\beta S_\gamma) = S_\alpha S_\beta^2 S_\gamma = (S_\alpha S_\gamma)$ : se  $S_\alpha = S_\gamma = 1 \Rightarrow (S_\alpha S_\gamma) = 1$ ; por outro lado, se  $S_\alpha = -1, S_\gamma = 1 \Rightarrow (S_\alpha S_\gamma) = -1$ ; caso  $S_\alpha = 1, S_\gamma = -1 \Rightarrow (S_\alpha S_\gamma) = -1$ ; e, finalmente, se  $S_\alpha = S_\gamma = -1 \Rightarrow (S_\alpha S_\gamma) = 1$ . Então,  $\sum_{\{S\}} (S_\alpha S_\beta) (S_\beta S_\gamma) = 1 - 1 - 1 + 1 = 0$ . Obviamente, neste caso, a condição  $\sum_{\{S\}}$  representa uma soma sobre **oito** ( $= 2^3$ ) distintas configurações, mas, já que  $S_\beta^2 = 1$ , podemos fazer a simplificação anterior. O mesmo ocorre para produtos de *spin* com diagramas *desconectados*, como na **Fig. 5 (c)**. Em contrapartida, nos diagramas fechados (veja as **Figs. 5 (d) e (e)**), os termos  $(S_{i_\alpha} S_{j_\alpha}) \dots (S_{i_\mu} S_{j_\mu})$  no somatório são sempre iguais a 1, pois os *spins*  $S_k$  são considerados um número par de vezes na multiplicação. Dessa maneira, o resultado da condição  $\sum_{\{S\}}$  será basicamente a quantidade de termos na soma, ou  $2^N$ . Definindo, então, a variável  $g_l$ , que simboliza o número total de gráficos formados por  $l$  linhas e exclusivamente por vértices de ordem par, a **Eq. 12** pode ser reescrita como:

$$Z_N = 2^N \cosh^{2N} (\beta \mathcal{J}_0) \sum_{l=0}^{\infty} g_l v^l \quad (14)$$

Em particular,  $g_0$  representa um único vértice *sem interação* com *spins* vizinhos ( $l = 0$ ). E, como só há um único modo de fazê-lo, naturalmente  $g_0 = 1$ . Vale ressaltar que os valores de  $g_1, g_2, g_5$ , e  $g_{11}$ , por exemplo, são todos nulos, haja vista a impossibilidade construir diagramas fechados com esta quantidade de linhas (ou de conexões), e, então, não alteram o valor da soma na **Eq. 14**. Neste ponto, a solução para o modelo Ising bidimensional transformou-se em um problema de determinação dos coeficientes  $g_l$ . Dois novos conceitos se fazem necessários, uma vez que irão acompanhar a derivação da energia livre daqui para frente: os *nós*, constituídos de vértices de quarta ordem (ou seja, mediadores de quatro interações com sítios vizinhos), e os *loops*, diagramas fechados que *não* apresentam nós. O exemplo mais simples de *loop* é o ilustrado pela **Fig. 5 (d)**.

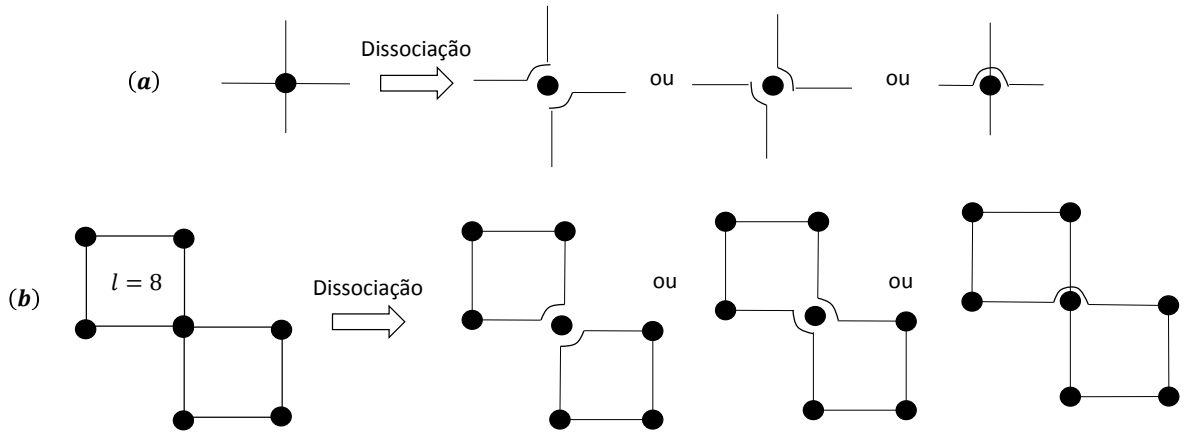


Figura 6: Representação esquemática do(a) **(a)** procedimento de dissolução de nós **(b)** decomposição do diagrama com  $l = 8$  por dissolução, resultando em 3 famílias de *loops*.

Com a finalidade de evitar ambiguidades, também precisamos estabelecer o procedimento de **dissolução de nós**. Isto porque um diagrama fechado complexo ( $l$  grande) na rede quadrada pode ter diversas configurações (veja a **Fig. 5 (e)** para dois formatos possíveis do diagrama com  $l = 12$ ), e o processo de dissolução é um algoritmo seguro para a contagem das **distintas** configurações, sem repetição. Existem **três** diferentes jeitos de se dissolver um nó, ilustrados

pela **Fig. 6 (a)**, acima. A última possibilidade é chamada de *auto-intersecção*, e reproduz aquele nó dentro do diagrama fechado. Por sua vez, a **Fig. 6 (b)** representa o processo de dissolução em um diagrama com  $l = 8$ . Assim, a divisão de  $k$  nós de um conjunto fechado de interações transforma-o em  $3^k$  **famílias** de *loops*, aumentando consideravelmente o número de diagramas separados em comparação à quantidade existente de circuitos fechados ( $l = 4, 8, 16, \dots$ ) do diagrama original. Para retomar o valor correto de  $g_l$ , o algoritmo da dissolução associa um sinal (ou fator de peso unitário)  $s_f(p)$  que multiplica o total de diagramas em cada família, corrigindo o resultado. Este fator de peso, para cada *loop*, é definido como  $s_l(p) = (-1)^\eta$ , onde  $\eta$  simboliza o número de auto-intersecções no *loop*. O mesmo valor de  $\eta$  pode ser obtido considerando-se a quantidade de ângulos  $2\pi$  “observados” ao longo de um caminho fechado no *loop*, onde uma rotação em sentido anti-horário (horário) representa um valor positivo (negativo) do ângulo. Portanto, o fator associado à *família* deve ser  $s_f(p) = \prod s_l(p) = (-1)^A$ , com  $A$  o número de auto-intersecções presentes na família. Por exemplo, tomemos o caso do diagrama fechado com  $l = 8$  (**Fig. 6 (b)**). Um raciocínio trivial permite concluir que, para este tipo de circuito, há apenas **uma** configuração possível ( $g_8 = 1$ ) – levando em conta a simetria da rede. Por outro lado, como pode ser observado na **Fig. 6 (b)**, o processo de dissolução transforma o circuito de 8 linhas em **duas** famílias de *loops* sem auto-intersecção e **uma** família de *loops* com uma auto-intersecção. Os fatores de peso associados a elas são:  $(-1)^0 = 1$  e  $(-1)^1 = -1$ , respectivamente. A multiplicação destes pesos pela quantidade de famílias derivadas pela dissolução deve resultar em  $g_8$ :  $2 \cdot 1 + 1 \cdot (-1) = 1$ . Da mesma forma, podemos calcular  $g_l$  para um gráfico com  $k$  nós e  $l$  linhas. Neste caso, há  $\binom{k}{j} = \frac{k!}{j!(k-j)!}$  jeitos de escolher  $j$  nós dos  $k$  totais, os quais, após a dissolução, apresentam apenas **uma** auto-intersecção. Os restantes  $(k - j)$  nós não levam a *loops* com auto-intersecções. Tal como verifica-se na **Fig. 6 (a)**, há sempre 2 possibilidades para cada um destes. Assim, existe um total de  $2^{k-j} \binom{k}{j}$  famílias possíveis que podem ser construídas com  $j$  auto-intersecções a partir de um circuito com  $k$  nós iniciais. Cada uma destas famílias, de acordo com as definições anteriores, está associada ao fator de peso  $s_f(p) = (-1)^j$ , e o peso somado de todas as famílias de *loops* do gráfico inicial será:  $\sum_{j=0}^k 2^{k-j} \binom{k}{j} (-1)^j = 1$ . Isto prova que, de fato, os sinais (ou fatores de peso)  $s_f(p)$  definidos para o gráfico genérico com  $k$  nós corrige o aumento de diagramas provocado pelo método de dissolução, levando a uma conclusão importante:  $g_l$  é exatamente a soma dos produtos entre as quantidades de famílias *loops* e os pesos a elas associados, construídas a partir de um circuito fechado com  $l$  linhas.

Sob outra perspectiva, se  $D_l$  é a soma dos pesos de todos os **loops** contendo  $l$  linhas, então  $D_l$  também pode ser diretamente vinculado a  $g_l$ . Isto é realizado por meio da relação (lembre-se que  $g_0 = 1$ ):

$$g_l = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{l_1, l_2, \dots, l_r \\ \sum_i l_i = l}} D_{l_1} D_{l_2} \dots D_{l_r}, \text{ se } l > 0 \quad (15)$$

Para entender melhor a **Eq. 15**, retomemos o exemplo do diagrama com  $l = 8$  (**Fig. 6 (b)**). A quantidade  $l_i$  é definida como o número de linhas pertencente à  $i$ -ésima configuração possível de *loop*, resultante do processo de dissociação do diagrama original. Deste modo, os *loops* originados do circuito contendo 8 linhas só podem ter  $l_i = 4$  ou  $l_i = 8$ . Como a somatória está delimitada pelo vínculo  $\sum_i l_i = l$ , se consideramos a formação dos *loops* quadrados ( $l = 4$ ), são necessários **dois** *loops* para manter a quantidade original de linhas. O somatório, neste caso, fica  $\sum_{\substack{l_1, l_2, \dots, l_r \\ \sum_i l_i = l}} D_{l_1} D_{l_2} \dots D_{l_r} = \sum_{l_1+l_2=8}^{l_1} D_{l_1} D_{l_2} = (1+1)(1+1) = 4$ . Obviamente, os valores de  $D_{l_1}$  e  $D_{l_2}$  são determinados a partir da definição de  $D_l$ : o peso  $s_l(p)$  do *loop* com  $l = 4$  é  $s_l(p) = (-1)^0 = 1 \Rightarrow D_{l_i} = 1$ . Por sua vez, como  $l_1 = l_2 = 4$ , cada  $l_i$  recebe

os pesos de duas configurações (permutação entre elas). Logo, calculando  $g_8$  a partir da **Eq. 15**:  $g_8 = \frac{1}{1!} \cdot (-1)^1 + \frac{1}{2!} \cdot 4 = 1$ . Apesar de a soma ser computada até  $r = \infty$ , os termos de ordem maior ( $r \geq 3$ ) são nulos, pois, por construção, não podemos associar a quantidade  $l_i$  a um vértice ( $l = 0$ ). Isto é, para termos do tipo  $l_1 = l_2 = 4$  e  $l_3 = 0$ , embora obedecem ao vínculo  $\sum_i l_i = l_1 + l_2 + l_3 = 8$ , os produtos  $D_{l_1} D_{l_2} D_{l_3}$  sempre desaparecerão, uma vez que  $D_{l_3} = 0$ . Na verdade,  $D_{l_i}$  só não será nulo quando estiver relacionado à *loops* com um número de lados múltiplo de 4, e diferente de zero. O fator  $\frac{1}{r!}$  dá conta das permutações extras entre os  $D_{l_i}$  que não deveriam ser considerados no cálculo de  $g_l$ . A partir **Eq. 15**, e recordando o resultado da **Eq. 14**:

$$g_l v^l = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{l_1, l_2, \dots, l_r \\ \sum_i l_i = l}} (D_{l_1} v^{l_1}) (D_{l_2} v^{l_2}) \dots (D_{l_r} v^{l_r}), \text{ se } l > 0$$

$$\Rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} g_l v^l = \underbrace{1}_{g_0} + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \left( \sum_{m=1}^{\infty} D_m v^m \right)^r = \exp \left( \sum_{m=1}^{\infty} D_m v^m \right)$$
(16)

E, finalmente, substituindo na função de partição  $Z_N$ :

$$Z_N = 2^N \cosh^{2N} (\beta \mathcal{J}_0) \exp \left( \sum_{m=1}^{\infty} D_m v^m \right)$$
(17)

Note que a condição  $\sum_i l_i = l$  foi desprezada na **Eq. 16** em razão de  $l$  variar de 0 a  $\infty$ , tornando este vínculo uma redundância. Já a **Eq. 17** indica que, agora, a solução foi redirecionada para a obtenção dos coeficientes  $D_m$ , que sintetizam os pesos de todos os *loops* possíveis de serem construídos com  $m$  linhas. Isto significa que o problema **real** pode ser traduzido na contagem de auto-intersecções de um *loop*.

Sendo assim, consideremos a rede quadrada de *spins* inserida sobre o **plano complexo**. Qualquer caminho nesse plano, entre os pontos  $P$  e  $P'$ , é formado de um conjunto de passos únicos, com módulo unitário, cujas direções permitidas são 1,  $i$ ,  $-1$ , e  $-i$ . Assim, um *loop* genérico contendo  $m$  linhas é naturalmente constituído de  $m$  destes passos. Em analogia ao fator de peso (ou sinal) associado aos *loops* e famílias anteriormente, podemos também definir um fator de peso  $s_c(p) = (-1)^{1+t}$  ligado ao caminho percorrido na rede, onde  $t$  é o número de ângulos  $2\pi$  “observados” ao longo do percurso. Para determinar o parâmetro  $t$ , basta seguir a regra: o ângulo total  $A_\phi$  vinculado ao caminho é a soma dos ângulos em cada vértice com sinal positivo (negativo) se o percurso está no sentido horário (anti-horário). Por definição,  $t = \frac{A_\phi}{2\pi}$ . Claramente,  $t$  será sempre um número inteiro, pois os caminhos (*loops*) considerados **devem** ser formados de vértices de ordem par. A **Fig. 7** mostra a determinação do fator de peso para o diagrama com  $l = 4$ . Da escolha de  $s_c(p)$ , verifica-se que  $s_c(p) = -s_l(p)$ . Introduzindo a matriz  $\mathbf{M}_m = (M_m)_{ij}$ , cujos elementos  $\langle P | M_m | P' \rangle$  indicam a soma dos pesos de todos os caminhos entre os pontos  $P$  e  $P'$  constituídos de  $m$  passos, então, se  $m = m_1 + m_2$ , podemos escrever:

$$\langle P | M_m | P' \rangle = \sum_{P''} \langle P | M_{m_1} | P'' \rangle \langle P'' | M_{m_2} | P' \rangle = \mathbf{M}_{m_1} \mathbf{M}_{m_2}$$
(18)

O produto de matrizes explicitado pela **Eq. 18** pode ser generalizado para o caso  $m = \underbrace{1 + 1 + \dots + 1}_{m \text{ vezes}}$ , produzindo a identidade  $\mathbf{M}_m = (\mathbf{M}_1)^m$ . É importante ressaltar que os elementos de matriz de  $\mathbf{M}_m$  são nulos se o ponto  $P'$  não é atingido a partir do ponto  $P$  em  $m$  passos.

Como a rede possui  $N$  sítios e há quatro direções possíveis para cada passo, logo a matriz  $\mathbf{M}_1$ , que representa os pesos de todos os caminhos caracterizados por um **único** passo, deve ter dimensão  $4N \times 4N$ . Esta matriz apresenta vários elementos nulos, uma vez que as contribuições não-nulas só ocorrem se os sítios  $P$  e  $P'$  são primeiros vizinhos. A relação entre  $D_m$  e  $\mathbf{M}_m$  deve

ter a forma:  $D_m = -\frac{1}{2m} \sum_P \langle P|M_m|P \rangle$ , pois, como  $D_m$  está relacionado aos caminhos fechados,  $P \equiv P'$ , e o fator  $\frac{1}{2m}$  dá conta das ambiguidades – neste circuitos, cada um dos  $m$  sítios pode ser um ponto de partida, havendo *dois* sentidos para percorrê-lo. O sinal “–”, por sua vez, vem do fato que o fator de peso associado ao caminho é oposto do fator de peso vinculado ao *loop*. Logo,  $D_m = -\frac{1}{2m} \sum_P \langle P|M_m|P \rangle = -\frac{1}{2m} \text{Tr}(\mathbf{M}_1^m)$ .

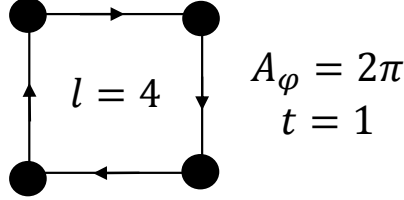


Figura 7: Determinação do fator de peso  $s_c(p)$  para o circuito fechado com 4 linhas. O caminho é percorrido em sentido horário.

Se  $\{\lambda_i\} = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$  são os autovalores de  $\mathbf{M}_1$ , então  $\text{Tr}(\mathbf{M}_1^m) = \sum_{k=1}^p \lambda_k^m$ . Desta igualdade, o termo  $\sum_{m=1}^{\infty} D_m v^m$  da função de partição fica:  $\sum_{m=1}^{\infty} D_m v^m = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^p \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\lambda_k^m v^m}{m} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^p \ln(1 - v\lambda_k) = \ln\left(\prod_{k=1}^p (1 - v\lambda_k)^{\frac{1}{2}}\right) = \ln(\det(\mathbb{1} - v\mathbf{M}_1))^{\frac{1}{2}}$ . Isto leva à seguinte expressão para a função de partição:

$$Z_N = 2^N \cosh^{2N}(\beta\mathcal{J}_0) \ln(\det(\mathbb{1} - v\mathbf{M}_1))^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

As próximas etapas são destinadas, basicamente, à solução do determinante da matriz  $\mathbf{M}_1$ . Por possuir dimensão  $4N \times 4N$  e conter inúmeros elementos nulos, o resultado é atingido transformando-se  $\mathbf{M}_1$  em uma matriz em blocos com dimensão  $4 \times 4$ . Assim, o termo  $\det(\mathbb{1} - v\mathbf{M}_1)$ , na **Eq. 19**, é dado pelo produto dos determinantes de matrizes menores e facilmente resolvíveis. Com a finalidade de encurtar a derivação da energia livre, omitiremos esta parte técnica. Após esta etapa, a função de partição apresenta a forma final:

$$Z_N = 2^N \cosh^{2N}(\beta\mathcal{J}_0) \sqrt{\prod_q \left[ (1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)(\cos q_1 + \cos q_2) \right]} \quad (20)$$

onde  $q_i = \frac{2\pi}{N_i}(1, 2, \dots, N_i)$ ,  $i = 1, 2$ , e  $N = N_1 N_2$ . Considerando o limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), e colocando a **Eq. 20** na expressão para a energia livre de Helmholtz válida para este regime:  $f_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( -\frac{k_B T}{N} \ln(Z_N) \right)$ , após algumas modificações (e lembrando que, no limite do contínuo, as somas podem ser substituídas por integrais), enfim, a energia livre do caso bidimensional pode ser escrita da seguinte maneira:

$$-\beta f = \ln(2) + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} dq_1 dq_2 \ln \left[ (1 - \sinh(2\beta\mathcal{J}_0))^2 + \sinh(2\beta\mathcal{J}_0)(2 - \cos q_1 - \cos q_2) \right] \quad (21)$$

que é a fórmula de Onsager [26]. Esta integral não possui uma forma fechada. Entretanto, sabendo-se que uma transição de fase ocorre quando observamos alguma “irregularidade” na função da energia livre, verifica-se pela **Eq. 21** que esta condição é **satisfeita** se o argumento do logaritmo natural é *zero*. Isto significa que  $q_1 = q_2 = 2\pi$ , e  $\sinh(2\beta\mathcal{J}_0) = 1$ . Esta última identidade leva à temperatura crítica do sistema, que depende, como esperado, da intensidade da interação  $\mathcal{J}_0$ :

$$T_C = \frac{2\mathcal{J}_0}{k_B \ln(1 + \sqrt{2})} \quad (22)$$

Já o resultado exato da magnetização espontânea é:

$$M(T) = \begin{cases} 0, & \text{para } T \geq T_C \\ \left(1 - \frac{1}{\sinh\left(\frac{2J_0}{k_B T}\right)}\right), & \text{para } T < T_C \end{cases} \quad (23)$$

Portanto, diferentemente do caso unidimensional, o modelo de Ising em 2D **sem** campo magnético externo aplicado surpreendentemente apresenta um intervalo de temperaturas com magnetização espontânea não-nula. A **Fig. 8**, abaixo, ilustra o diagrama de fases correspondente.

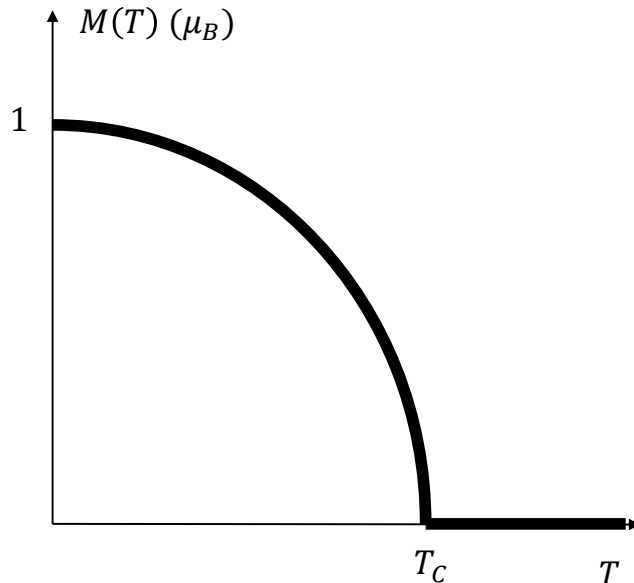


Figura 8: Diagrama de fase para o caso bidimensional do modelo de Ising.

## 4 Considerações finais

Embora tenha sido elaborado para ser uma aproximação simples da hipótese de Heisenberg – que considera apenas estados triviais de *spin* ( $S = \pm 1$ ) –, o modelo de Ising retrata com fidelidade a complexidade do Magnetismo Quântico. A teoria moderna, que se desenvolveu concomitantemente com o advento da Mecânica Quântica, não é caracterizada por um ramo *sui generis* da Física, mas emaranha-se com a investigação da estrutura eletrônica, correlações, e outros efeitos intrínsecos a sistemas de muitos corpos.

Com a mudança de dimensão  $1D \rightarrow 2D$ , o modelo de Ising apresentou características termodinâmicas distintas, passando a manifestar uma transição de fase à  $T > 0$ . Trata-se, portanto, de um exemplo claro do conceito abordado por Laughlin e Pines [31], em que a emergência de novos fenômenos está diretamente relacionada aos princípios superiores de organização aos quais o sistema está submetido, dentre eles a (falta de) simetria de inversão, e sua dimensionalidade.

Nosso conhecimento a respeito do magnetismo em materiais atingiu um patamar surpreendente: na literatura estão catalogados inúmeros efeitos a ele associados, tais como a formação de *skyrmions*, frustrações magnéticas, efeitos de paridade, além de sistemas com interações de longo alcance e que exibem ordenamentos não-colineares entre *spins*. Entretanto, ainda muito há trabalho a fazer. Esperamos, com este artigo, estimular alguns dos leitores a se aprofundarem neste tema, em especial no modelo de Ising.

## Referências

- [1] A. Moser, K. Takano, D. T. Margulies, M. Albrecht, Y. Sonobe, Y. Ikeda, S. Sun and E. E. Fullerton, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2002, **35**, R157.
- [2] T. Moriya, *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany, 1985.
- [3] F. Bloch, *Zeitschrift für Physik*, 1929, **57**, 545.
- [4] P. Mohn, *Magnetism in the Solid State: An Introduction*, Springer, 2003.
- [5] N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J. E. Bickel, B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka and R. Wiesendanger, *Science*, 2013, **341**, 636.
- [6] B. Dupé, M. Hoffmann, C. Paillard and S. Heinze, *Nat. Commun.*, 2014, **5**, 4030.
- [7] S. Polesya, S. Mankovsky, S. Bornemann, D. Ködderitzsch, J. Minár and H. Ebert, *Phys. Rev. B*, 2014, **89**, 184414.
- [8] A. Bergman, L. Nordström, A. Burlamaqui Klautau, S. Frota-Pessôa and O. Eriksson, *Phys. Rev. B*, 2007, **75**, 224425.
- [9] S. Lounis, P. Dederichs and S. Blügel, *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **101**, 107204.
- [10] S. Holzberger, T. Schuh, S. Blügel, S. Lounis and W. Wulfhekel, *Phys. Rev. Lett.*, 2013, **110**, 157206.
- [11] M. A. Ruderman and C. Kittel, *Phys. Rev.*, 1954, **96**, 99.
- [12] K. Yosida, *Phys. Rev.*, 1957, **106**, 893.
- [13] T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.*, 1956, **16**, 45.
- [14] M. M. Bezerra-Neto, M. S. Ribeiro, B. Sanyal, A. Bergman, R. B. Muniz, O. Eriksson and A. B. Klautau, *Sci. Rep.*, 2013, **3**, 3054.
- [15] D. J. Singh and M.-H. Du, *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **100**, 237003.
- [16] P. Weiss, *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, 1907, **6**, 661.
- [17] W. Heitler and F. London, *Zeitschrift für Physik*, 1927, **44**, 455.
- [18] W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik*, 1928, **49**, 619.
- [19] W. Nolting and A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2009.
- [20] J. Frenkel, *Zeitschrift für Physik*, 1928, **49**, 31.
- [21] J. Dorfman and R. Jaanus, *Naturwissenschaften*, 1928, **16**, 1026.
- [22] A. I. Akhiezer, V. G. Bar'yakhtar and S. V. Peletminskii, *Spin Waves*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1968.
- [23] M. Pajda, J. Kudrnovsky, I. Turek, V. Drchal and P. Bruno, 2000.
- [24] E. Ising, *Zeitschrift für Physik*, 1925, **31**, 253.



- [25] A. P. Guimarães, *Principles of Nanomagnetism*, Springer-Verlag Heidelberg, Berlin, Germany, 2009.
- [26] L. Onsager, *Phys. Rev.*, 1944, **65**, 117.
- [27] R. Peierls, *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 1936, **32**, 477.
- [28] T. D. Schultz, M. D. C. and E. H. Lieb, *Rev. Mod. Phys.*, 1964, **36**, 856.
- [29] M. J. Stephen, *Journal of Mathematical Physics*, 1972, **13**, 1944.
- [30] M. L. Glasser, *American Journal of Physics*, 1970, **38**, 1033.
- [31] R. B. Laughlin and D. Pines, *PNAS*, 2000, **97**, 28.