

# De Ising a Metropolis

(From Ising to Metropolis)

Valter L. Líbero

*Departamento de Física e Informática*

*Instituto de Física de São Carlos - USP*

*C. P. 369, 13560-970, São Carlos, SP, Brazil*

Recebido em 15 de Janeiro, 2000. Aceito em 5 de Maio, 2000

O modelo de Ising por sua formulação simples e solução exata não trivial em redes bidimensionais é frequentemente referência ao se construir novas técnicas de cálculo, analíticas ou numéricas. Este artigo compara os resultados exatos de Onsager para a magnetização, energia média e calor específico, com resultados obtidos de duas técnicas consagradas, a aproximação de campo médio, e o algoritmo Monte Carlo de Metropolis.

The two-dimensional Ising model by its simple formulation and non trivial solution is often used as a reference when new numerical or analytical techniques are developed. This paper compares the exact results obtained by Onsager for magnetization, mean energy and specific heat, with results from two well known procedure, the mean-field approximation and the Monte Carlo algorithm of Metropolis.

## I Introdução

Não é possível falarmos de magnetismo sem referência ao modelo de Ising.[1] Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising, tinha como objetivo estudar um dos fenômenos mais importantes em matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos localizados. O modelo inicial era bem simples, uma cadeia linear de momentos magnéticos  $S_i$  interagindo com seus vizinhos  $S_{i+1}$  e  $S_{i-1}$  na forma  $-JS_i(S_{i+1} + S_{i-1})$ . Para  $J > 0$  o alinhamento paralelo dos momentos é favorecido, o que compete com a desordem imposta pela temperatura. Dessa competição era esperada uma temperatura crítica abaixo (acima) da qual haveria (não haveria) ordenamento de toda cadeia. Para desapontamento de Ising, e certamente do seu orientador, esse modelo não apresenta transição para uma fase ordenada em qualquer temperatura  $T$  diferente de zero. Entende-se esse desapontamento já que a melhor teoria de magnetismo da época, a teoria do campo molecular de Pierre Weiss,[2] previa transição de fase em temperatura não nula independente da dimensão do sistema. Hoje, com argumentos até relativamente simples, sabemos que em uma dimensão a cadeia de spins é instável em qualquer temperatura não nula, ordenando-se apenas em  $T = 0$ .

O resultado obtido por Ising, que é correto, não deve ser visto como fracasso. O pecado de Ising foi na verdade ter conjecturado que em duas ou mais dimensões também não haveria transição de fase, o que

sabemos está errado. A idéia central do modelo, a interação entre momentos magnéticos localizados em uma rede, parecia boa demais para levar a tantos fracassos. Isso parece ter motivado Heisenberg em 1928 a propor um modelo semelhante ao de Ising, porém, com os  $S_i$  substituídos por operadores de spins  $\vec{S}_i$ ; o caráter quântico dos momentos magnéticos passou a ser importante.[3] O modelo de Heisenberg é ainda um dos mais estudados.[4] Sua sofisticação é tamanha que na verdade em muitas situações volta-se à formulação mais simples de Ising, que com o tempo ganhou generalidade e é abordado com técnicas refinadas, tanto em duas como em três dimensões. O objetivo deste artigo é mostrar de forma didática algumas dessas técnicas. Uma são simples, como a teoria do campo médio (TCM), outras mais elaboradas, como Monte Carlo.

Além de ferromagnetismo, o modelo de Ising também pode descrever outros sistemas físicos, como o gás de rede e a liga binária. Em 1952 Yang e Lee [5] usaram o termo gás de rede para descrever um modelo em que  $M$  átomos ocupam aleatoriamente os  $N > M$  sítios de uma rede. A cada par de sítios vizinhos ocupados dá-se uma energia  $E = E_0$ ; se num par vizinho faltar pelo menos um átomo tem-se  $E = 0$ . A interação tem a mesma forma anterior,  $-JS_i(S_{i+1} + S_{i-1})$ , mas  $S_i$  pode ter os valores 0 (ausência de átomo) ou 1 (presença de átomo). Hidrogênio adsorvido em uma superfície (110) de ferro é o sistema protótipo. Já a liga binária consiste em dois tipos de átomos ocupando aleatoriamente

os sítios de uma rede. Dependendo se os vizinhos são do mesmo tipo (mesmo átomo) ou não atribui-se energia diferente ao par. Neste caso,  $S_i = 1$  representa um tipo de átomo enquanto  $S_i = -1$  representa o outro tipo. O sistema protótipo é a liga cobre-zinco.

Existem generalizações naturais do modelo de Ising, que são importantes em determinadas situações ao se descrever sistemas mais realistas. Por exemplo, a introdução de interações entre segundos vizinhos, variável  $S_i$  de mais de dois valores (ou spin maior que 1/2), interações envolvendo três ou quatro sítios, etc. Por questões de didática, vamos nos ater apenas ao caso de redes bidimensionais, quadradas, com  $S_i = \pm 1$  e interações de primeiros vizinhos. Além disso, usaremos apenas a versão do modelo para ferromagnetismo.

## II Modelo de Ising para ferromagnetismo

Para uma rede linear com  $N$  sítios, a Hamiltoniana que descreve o modelo de Ising é

$$H = -J \sum_i^{N-1} S_i S_{i+1}. \quad (1)$$

Comumente considera-se que a variável  $S_i$  possa ter apenas dois valores,  $\pm 1$ , assim *imitando* os estados de um spin 1/2. No dia-a-dia até nos referimos a  $S_i$  como um spin (spin de Ising), mas há de se entender que nesse modelo os  $S_i$  não seguem nenhuma relação de comutação de momento angular. Quando o termo de interação  $J$ , chamado de termo de troca, for positivo os spins tendem a se orientar numa mesma direção e assim formar uma fase ferromagnética. Quando  $J$  for negativo a tendência é a orientação antiparalela e portanto de formar uma fase antiferromagnética.

Peierls, em 1936, foi o primeiro a demonstrar que o modelo de Ising em duas ou mais dimensões apresentava transição de fase em temperatura não nula.[6] Ele demonstrou que a ordem de longo alcance presente em  $T = 0$ , isto é, o ordenamento de todos os spins, persistia mesmo aumentando-se a temperatura levemente; apenas a partir de uma dada temperatura finita, denominada de crítica, é que esse ordenamento desapareceria. Isso certamente criou euforia em torno do modelo, que agora dava esperanças de descrever uma transição de fase magnética. O argumento de Peierls é facilmente elaborado em uma dimensão e resulta em temperatura crítica  $T_c = 0$ : partindo de uma cadeia de spins alinhados, Fig.1(a), viramos todos os spins a partir de um certo sítio, como na Fig.1(b). A energia inicial era  $E_i = -NJ$  que passou a ser  $E_f = -(N-1)J + J$ . Assim,  $\Delta E = E_f - E_i = 2J$  é maior que zero e portanto em  $T = 0$  o sistema *prefere* ficar todo alinhado. Essa quebra pode se dar em qualquer uma das  $N$  ligações entre os spins. Então, teremos  $N$  configurações para

uma dada variação  $\Delta E = 2J$ , resultando numa entropia  $S_f = k_B \ln 2^N$ . A entropia inicial é zero já que há apenas um estado em  $T = 0$ . Portanto, a uma certa temperatura finita a variação do potencial de Gibbs é  $\Delta G = \Delta E - T\Delta S = 2J - k_B T \ln 2^N$ . No limite termodinâmico, isto é,  $N \rightarrow \infty$ , para qualquer  $T \neq 0$  teremos  $\Delta G < 0$ , mostrando assim que a cadeia linear é instável contra qualquer mudança de spin. Em outras palavras, para  $T \neq 0$  o sistema *prefere* ter todas as suas ligações com spins antiparalelos. Em duas ou mais dimensões Peierls mostrou que esse mesmo argumento não diminui  $G$ , a não ser acima de uma temperatura crítica  $T_c \neq 0$  e portanto, é possível haver uma fase ordenada para  $T \neq 0$ .

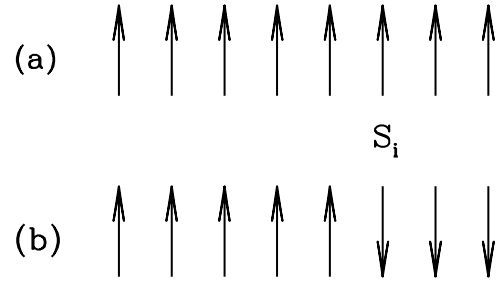


Figura 1. (a) Cadeia linear de spins  $S_i = \pm 1$  ordenados. Cada spin interage com seus dois vizinhos através de um termo de troca  $J$ . (b) O custo energético para virar parte da cadeia como ilustrado a  $2J$ , que corresponde à energia para quebrar uma ligação  $\uparrow\uparrow$  e formar uma ligação  $\uparrow\downarrow$ .

O argumento de Peierls não determina qual é a temperatura crítica, mas apenas afirma que ela existe e é não nula em duas dimensões. Em face das dificuldades matemáticas envolvidas os primeiros métodos a procurarem pela solução do modelo de Ising consistiam em se expandir a função de partição em séries de potências de  $J/k_B T \equiv \beta J$  para temperaturas altas ou em potências de  $\exp(-\beta J)$  para temperaturas baixas.[7] Apenas em 1941 com Kramers e Wannier [8] é que se determinou o valor exato da temperatura crítica para uma rede quadrada. Eles mostraram que a função de partição numa temperatura  $T$  relaciona-se com a função de partição numa temperatura  $T^*$  através da relação:

$$Z(T^*) \cosh^N 2\beta J = Z(T) \cosh^N 2\beta^* J, \quad (2)$$

sempre que  $T$  e  $T^*$  se relacionarem por

$$\sinh 2\beta^* J \sinh 2\beta J = 1. \quad (3)$$

Assumindo que houvesse apenas um ponto singular na função de partição, o que foi provado apenas em 1952 por Yang e Lee,[5] ela tem que ocorrer para  $T_c^* = T_c$ . Assim,  $T_c$  vale

$$\sinh \beta_c J = 1 \rightarrow k_B T_c / J \approx 2.269185. \quad (4)$$

Expressões exatas para a função de partição, energia média, magnetização e calor específico foram obtidas em 1944 por Onsager.[9] Embora expressas em

termos de integrais elípticas de primeira ou segunda espécie, essas expressões são relativamente simples. Elas são encontradas, por exemplo, na referência [10]. Nas próximas sessões vamos mostrar resultados obtidos por técnicas alternativas e compará-los com os resultados exatos obtidos por Onsager. Esse, alias, é o maior mérito do modelo de Ising, ou seja, ter solução exata. Isso permite comparações com resultados obtidos de outras abordagens mais gerais, muitas vezes aproximadas, mas que podem ser aplicadas em modelos mais realistas.

### III Campo médio

A crescente sofisticação dos modelos descrevendo magnetismo tem aumentado consideravelmente as dificuldades matemáticas em suas abordagens. A técnica de campo médio (TCM), de longe a mais simples de todas, permite que se faça um estudo preliminar do modelo, que pode servir de base para implementações mais sofisticadas. O fato do modelo de Ising ter solução exata constitui oportunidade, um tanto rara, de se verificar o valor da TCM.

Existem vários caminhos alternativos para se implementar a TCM. Em todos, a idéia é que cada spin da rede está na presença de um campo magnético efetivo produzido por todos os demais spins. Esse campo é proporcional à magnetização média do sistema e como consequência, apenas parte da flutuação de cada spin em torno de seu valor médio é considerada. Vamos partir dessa idéia e implementar a TCM de maneira a enfatizar que estamos considerando apenas as flutuações em primeira ordem. Primeiramente, tomemos a versão em duas dimensões da Hamiltoniana dada pela Eq. 1:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, \quad (5)$$

onde  $i$  e  $j$  são sítios vizinhos numa rede quadrada de  $N$  sítios ao todo. Substituindo cada spin  $S_i$  por seu valor médio  $\bar{S}_i$  mais sua flutuação  $\Delta S_i = S_i - \bar{S}_i$ , isto é, fazendo

$$S_i = \bar{S}_i + \Delta S_i, \quad (6)$$

até primeira ordem em  $\Delta S_i$  a Hamiltoniana fica

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\bar{S}_i \bar{S}_j + \bar{S}_i \Delta S_j + \bar{S}_j \Delta S_i), \quad (7)$$

que substituindo  $\Delta S_i$  de volta resulta em

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (-\bar{S}_i \bar{S}_j + \bar{S}_i S_j + \bar{S}_j S_i). \quad (8)$$

Essa Hamiltoniana é bem mais simples que a inicial, uma vez que não contém operadores quadráticos; é uma Hamiltoniana de um corpo. Invariança translacional implica que  $\bar{S}_i = \bar{S}_j \equiv \bar{S}$  e portanto

$$H = -\frac{1}{2} 2J 4\bar{S} \sum_i S_i + \frac{1}{2} 4JN\bar{S}^2. \quad (9)$$

O fator 4 em ambos os termos da direita vem da soma sobre os quatro sítios vizinhos ao spin  $S_i$ , enquanto o fator 1/2 compensa a dupla contagem de cada ligação  $S_i$  com  $S_j$ . Agora é simples diagonalizar  $H$ . As energias dependem da configuração  $\{S\}$  dos spins em toda a rede (na verdade só dependem de quantos spins +1 ou -1 existem) e podem ser expressas por

$$E_{\{S\}} = -4J\bar{S} \sum_i S_i + 2JN\bar{S}^2. \quad (10)$$

A função de partição pode então ser determinada:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S\}} e^{-\beta E_{\{S\}}} = e^{-2\beta JN\bar{S}^2} \sum_{S_1, S_2, \dots, S_N} e^{4\beta J\bar{S} \sum_i S_i} \\ &= e^{-2\beta JN\bar{S}^2} \prod_i \sum_{S_i = \pm 1} e^{4\beta J\bar{S} S_i}. \end{aligned} \quad (11)$$

Como  $S_i = \pm 1$ ,

$$Z = e^{-2\beta JN\bar{S}^2} 2^N \cosh^N 4\beta J\bar{S}. \quad (12)$$

Da função de partição podemos obter outras funções termodinâmicas. A magnetização por spin e em unidades de  $g\mu_B$  é definida por

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \frac{1}{N} \sum_i S_i = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \frac{1}{N} \sum_i S_i e^{-\beta E_{\{S\}}} \\ &= \frac{1}{NZ} \sum_{\{S\}} \left( \sum_i S_i \right) e^{4\beta J\bar{S} (\sum_i S_i) - 2\beta JN\bar{S}^2}. \end{aligned} \quad (13)$$

Chamando  $4\beta J\bar{S}$  temporariamente de  $\alpha$  podemos reescrever essa equação convenientemente como

$$\bar{S} = \frac{1}{NZ} \frac{d}{d\alpha} Z = \frac{1}{N} \frac{d}{d\alpha} \ln Z, \quad (14)$$

que substituindo  $Z$  dado pela Eq.12 resulta em

$$\bar{S} = \tanh(4\beta J\bar{S}). \quad (15)$$

Esse resultado foi obtido por Weiss em 1907 por um procedimento equivalente ao apresentado e que enfatizou a presença do campo médio atuando sobre cada spin.

A Fig. 2 mostra os lados esquerdo e direito da equação acima em função da variável  $\bar{S}$ . Para uma certa temperatura  $T_c$  a função do lado direito tem inclinação unitária e apenas a solução trivial  $\bar{S} = 0$  aparece. Para  $T < T_c$  há uma solução não nula e pode se mostrar que ela minimiza a energia livre  $F = -k_B T \ln Z$ . É, portanto, estável e corresponde à magnetização  $\bar{S}$  do

sistema. Para  $T > T_c$  nenhuma solução não nula aparece. A temperatura  $T_c$  é denominada de crítica e é, portanto, obtida da condição de inclinação unitária:

$$4\beta_c J = 1 \quad \rightarrow \quad k_B T_c / J = 4. \quad (16)$$

A solução exata é  $k_B T_c \approx 2.2692J$ , portanto, o campo médio superestima  $T_c$  em pouco mais de 50 %. Esse procedimento de TCM quando elaborado para uma rede com número de coordenação  $q$  (número de primeiros vizinhos de um sítio qualquer) fornece  $k_B T_c / J = q$ , independente da dimensão da rede. Daí a esperança de Ising de obter uma transição de fase em seu modelo unidimensional (TCM prevê  $k_B T_c / J = 2$  neste caso).

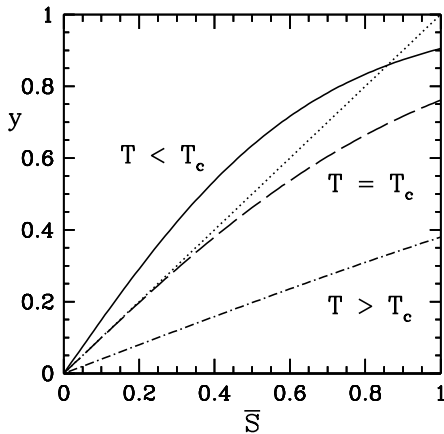


Figura 2. Método gráfico para solução da Eq. 15. A solução de equilíbrio  $\bar{S}$  numa dada temperatura  $T$  é encontrada pela interseção da reta  $y = \bar{S}$ , linha pontilhada, com a função  $y = \tanh(4\beta J \bar{S})$ . Para  $T \geq T_c$ , linhas tracejadas, a única interseção é para  $\bar{S} = 0$ . Para  $T < T_c$ , linha contínua, além de  $\bar{S} = 0$  temos uma solução não nula estável.

A energia média  $\bar{E}$  pode também ser facilmente calculada:

$$\bar{E} = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \sum_i E_i e^{-\beta E_{\{S\}}} = -\frac{d}{d\beta} \ln Z = -2JN\bar{S}^2, \quad (17)$$

onde usamos a Eq. 12 para  $Z$  e a Eq. 15 para  $\bar{S}$ .

Determinaremos apenas mais uma função termodinâmica, o calor específico  $C$ :

$$C = \frac{d\bar{E}}{dT} = -4NJ\bar{S} \frac{d\bar{S}}{dT} = 16Nk_B(\beta J)^2 \bar{S}^2 \frac{1}{\cosh^2(4\beta J \bar{S}) - 4\beta J}. \quad (18)$$

Tanto a energia média como o calor específico dependem diretamente da magnetização  $\bar{S}$ . Para  $T > T_c$  temos que  $\bar{S} = 0$ , o que é correto, mas leva  $\bar{E}$  e  $C$  também a zero, o que é incorreto. Na TCM os spins *sentem* uns aos outros somente através do campo médio que é proporcional à magnetização. Acima de  $T_c$  sendo  $\bar{S} = 0$ , os spins estão absolutamente livres, daí a energia total ser constante e igual a zero e conseqüentemente o

calor específico também ser igual a zero. Nessa aproximação, a entropia permanece em  $k_B \ln 2^N$  para qualquer  $T \geq T_c$ . Flutuações da magnetização presentes mesmo em  $T > T_c$  são ignoradas pela TCM, e isso leva a esse cenário. Essas flutuações existem devido à ordem de curto alcance entre os spins; apenas a ordem de longo alcance é nula.

Existem vários esquemas alternativos que levam em conta flutuações da magnetização em ordem mais alta. Salientamos apenas o esquema de Bethe[11] de 1935, que consiste em tratar de forma exata a interação de um spin central, digamos  $S_0$ , com os seus vizinhos  $S_j$ , enquanto a interação destes últimos com os demais spins da rede é feita de forma análoga a anterior, isto é, através de um campo médio. Esse campo é determinado pela condição de consistência  $\bar{S}_0 = \bar{S}_j$ . Uma melhora considerável é obtida por esse esquema. Em particular, a energia média e o calor específico não se anulam para  $T > T_c$  e para  $T \gg T_c$  ou  $T \ll T_c$  são assintoticamente corretos. O valor de  $T_c$  também é bem mais próximo do exato:  $k_B T_c / J = 2 / \ln(q/(q-2))$  igual a 2.8854 para uma rede quadrada, contra 4 do campo médio. Em uma dimensão o valor de  $q$  é 2 e o esquema de Bethe prevê corretamente  $T_c = 0$ . Para redes com número de coordenação muito grande tanto TCM como Bethe prevêem a mesma temperatura crítica.

A Eq. 15 pode ser resolvida numericamente para cada temperatura, e as soluções substituídas na Eq. 17 ou na Eq. 18. Nas Fig. 3, 4 e 5 são comparados a magnetização, a energia média e o calor específico, em função da temperatura, com as respectivas soluções exatas. Essas figuras mostram também as soluções aprimoradas de Bethe.

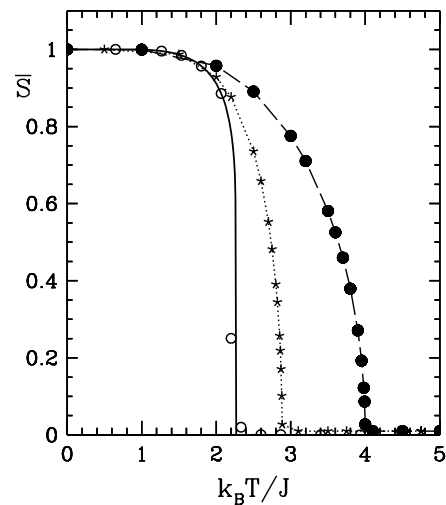


Figura 3. Magnetização média por spin e em unidades  $g\mu_B$  obtida pela aproximação de campo médio ( $\bullet$ ), Eq. 15, comparada com o resultado exato de Onsager (linha contínua). Também é mostrada uma solução de campo médio melhorada ( $\star$ ), devido a Bethe. Os círculos vazios ( $\circ$ ) foram obtidos da simulação Monte Carlo para uma rede quadrada contendo 1600 sítios.

Como se vê dessas figuras, campo médio fornece bons resultados onde as flutuações são pouco importantes. Isso acontece longe da temperatura crítica. Veja que próximo de  $T = 0$  como o sistema está praticamente ordenado não deve haver grandes flutuação dos spins e a solução de campo médio é boa. Para  $T > T_c$  mesmo não tendo magnetização, ou seja, não tendo ordem de longo alcance, foi importante considerar flutuações dos spins; o desprezo delas levou a  $\bar{E} = 0$  e  $C = 0$  na TCM; já no esquema de Bethe, que leva flutuações mais em conta, isso não ocorre.

Pode-se mostrar que a TCM torna-se mais precisa a medida que o número de coordenação da rede aumenta. No limite de coordenação infinita, ou de dimensão da rede infinita, a TCM é exata. Por exemplo, denotando a temperatura crítica de campo médio por  $T_c^{cm}$  e de  $T_c$  a exata, temos que, para  $S_i = \pm 1$ , numa rede quadrada  $T_c^{cm}/T_c$  vale 1.76 enquanto para uma rede cúbica simples vale 1.33 e para uma rede cúbica de face centrada vale 1.23. Enquanto outras técnicas, como a de Monte Carlo descrita abaixo, tornam-se cada vez mais computacionalmente onerosas a medida que a dimensão do sistema aumenta, a TCM torna-se cada vez melhor. Aliada ao fato dela prever de forma qualitativamente correta o diagrama de fases em três ou mais dimensões, ela se coloca como uma alternativa na abordagem de muitos problemas e como única fonte de informação em muitos casos. Sendo assim, não é raro encontrar-se na literatura trabalhos baseados exclusivamente na TCM.[12]

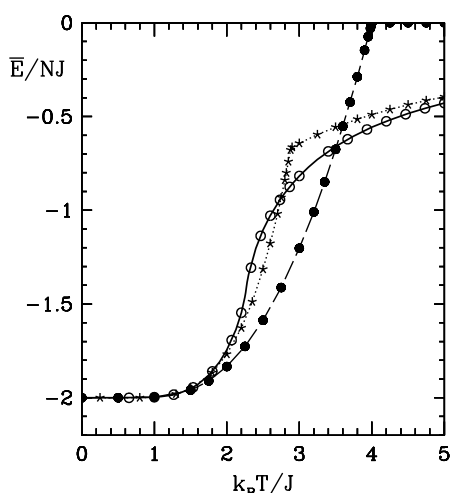


Figura 4. Energia média por spin e em unidades de  $J$  obtida pela TCM ( $\bullet$ ). A solução de Bethe também é mostrada ( $\star$ ), que diferentemente da TCM não se anula para  $T > T_c = 2.885$  e converge para o resultado exato para  $k_B T/J > 5$ . Os resultados de Monte Carlo ( $\circ$ ) coincidem com a solução exata de Onsager (linha contínua). Para  $T \rightarrow 0$  todos os spins estão alinhados de maneira que  $\bar{E}$  é igual ao número de ligações na rede,  $2N$ , vezes  $-J$  e, portanto,  $\bar{E}/(NJ) = -2$ . Para  $T \rightarrow \infty$  todas as correlações entre os spins devem se anular e portanto eles se comportarão como livres, resultando em  $\bar{E} = 0$ .

## IV Monte Carlo

Apesar do avanço de diversas técnicas analíticas hoje disponíveis, com o progresso alcançado pelos computadores o cálculo numérico passou a ser uma ferramenta importante, com profundo impacto no desenvolvimento das ciências em geral. Hoje é comum considerar-se que a Física se divide em experimental, teórica e computacional. Para enfatizar aqui a importância de cálculos numéricos, basta dizer que ainda não sabemos a solução analítica exata do modelo de Ising em três dimensões, mas de simulações numéricas sabemos todas as suas características. Soma-se também o fato de em simulações podermos alterar parâmetros físicos de forma conveniente, que dificilmente conseguiríamos experimentalmente (por, exemplo, parâmetros de rede, valores de potenciais atômicos, etc).

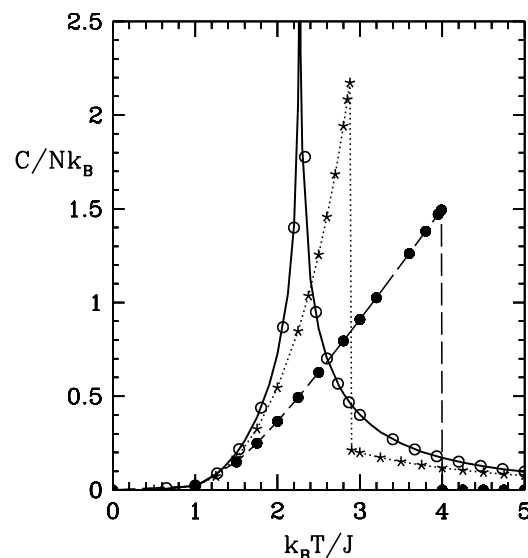


Figura 5. Calor específico obtido pela TCM ( $\bullet$ ) comparado com o resultado exato de Onsager (linha contínua) e com resultados de Monte Carlo ( $\circ$ ). A aproximação de Bethe ( $\star$ ) melhora bastante os resultados, e em particular o calor específico acima de  $T_c$  não se anula. Apresenta, no entanto, uma descontinuidade em  $T_c$ , sendo que a solução exata mostra uma divergência logarítmica.

Dentre as técnicas numéricas, a de Monte Carlo tem destaque em todas as áreas da Física. Suas aplicações vão desde mecânica estatística, como exemplificado abaixo, à física de partículas elementares. O marco histórico no desenvolvimento dessa técnica é o trabalho de Metropolis e colaboradores em 1953.[13] Farei uma introdução às idéias principais do algoritmo de Metropolis. Não tenho a intenção de justificar todos os procedimentos, mas de utilizar a técnica para obter resultados para o modelo de Ising. Uma breve justificativa pode ser encontrada na Ref. [14], enquanto um estudo mais detalhado é apresentado na Ref. [15]. Resultados

para o modelo Ising são exaustivamente mostrados na Ref. [16].

Como ficou explícito na sessão anterior, o cálculo de valores médios é comum em mecânica estatística. Para uma quantidade  $Q$  qualquer (por exemplo, magnetização ou energia) o seu valor médio é definido por

$$\bar{Q} = \frac{\sum_i^M Q(c_i) e^{-\beta E(c_i)}}{\sum_i^M e^{-\beta E(c_i)}}, \quad (19)$$

sendo  $E(c_i)$  a energia da  $i$ -ésima configuração  $c_i$ . Todas as configurações devem ser somadas, mas como isso é praticamente impossível para um sistema com muitos graus de liberdade o melhor é incluir apenas as  $M$  configurações mais importantes numa dada temperatura. Suponhamos que essas configurações mais importantes sejam escolhidas com uma certa probabilidade  $P(c_i)$ . Então,  $\bar{Q}$  passa a ser dada por

$$\bar{Q} = \frac{\sum_i^M Q(c_i) e^{-\beta E(c_i)} / P(c_i)}{\sum_i^M e^{-\beta E(c_i)} / P(c_i)}. \quad (20)$$

A escolha mais inteligente para  $P(c_i)$  naturalmente é  $P(c_i) = e^{-\beta E(c_i)} / Z$ , com  $Z = \sum_i^M e^{-\beta E(c_i)}$ , o que implica em

$$\bar{Q} = \frac{1}{M} \sum_i^M Q(c_i), \quad (21)$$

isto é, uma simples média aritmética. O problema é achar um procedimento que faça essa amostragem por importância das configurações (em vez de gerar todas as configurações). Foi o que fez Metropolis. Sua idéia foi construir uma seqüência de configurações  $c_1, c_2, \dots, c_k, c_{k+1}, \dots, c_M$  em que  $c_{k+1}$  fosse construída a partir de  $c_k$  através de uma probabilidade de transição  $W(c_k \rightarrow c_{k+1})$  previamente definida. É o que se chama um processo Markoviano. Para  $M$  suficientemente grande seria possível *escolher*  $W$  tal que uma configuração  $c_i$  gerada no processo Markoviano tenha probabilidade  $P(c_i) = e^{-\beta E(c_i)} / Z$ , como desejado.

Na implementação do programa de Monte Carlo começamos com uma rede de spins  $S_i = \pm 1$  dispostos aleatoriamente. Escolhemos um spin  $S_i$  e fazemos a mudança  $S_i \rightarrow -S_i$ . Se a diferença de energia entre a configuração após a mudança e antes dela,  $\Delta E = E(-S_i) - E(S_i)$ , for negativa aceitamos essa mudança em  $S_i$ . Se  $\Delta E > 0$ , sorteamos um número aleatório  $r$  no intervalo  $0 \leq r \leq 1$  e se  $\exp(-\beta \Delta E) > r$  também aceitamos a mudança. Só a rejeitamos se  $\exp(-\beta \Delta E) < r$ . Uma vez percorrida toda a rede fazendo essas mudanças usamos a configuração final de spins para calcular a média termodinâmica de acordo com a Eq. 21. Pode-se mostrar que esse procedimento gera um processo Markoviano em que as configurações atingem um equilíbrio termodinâmico. O leitor interessado pode consultar por exemplo as Ref. [14] e [15]. Na verdade, esse procedimento devido a Metropolis é

condição apenas suficiente; [18] existem outros algoritmos que podem gerar configurações em equilíbrio. [19]

A configuração aleatória com que se inicia a cadeia de Markov certamente não corresponde àquela de equilíbrio na temperatura de interesse. Então, antes de calcular qualquer média percorremos toda a rede muitas vezes (milhares de vezes) aceitando e rejeitando configurações. No final teremos uma rede termalizada, isto é, as configurações corresponderão ao equilíbrio termodinâmico naquela temperatura. Só então passamos a gerar novas configurações e calcular médias.

Existem versões sofisticadas de programas de Monte Carlo para spins em redes, que utilizam recursos modernos de computação como processadores dedicados, vetorização, etc. É possível, no entanto, encontrar versões mais simples em livros textos, como o da Ref. [17] para redes bidimensionais quadradas e o da Ref. [15] para redes tridimensionais cúbicas. O leitor pode também tentar fazer o seu próprio programa, não é difícil.

Nas Fig. 3, 4 e 5 são comparados resultados para magnetização, energia média e calor específico obtidos por Monte Carlo (o) com os respectivos resultados exatos obtidos por Onsager (linha contínua). Utilizou-se uma rede quadrada com 1600 sítios. Foram feitas 10.000 varreduras sobre a rede para termalizá-la e  $M = 2.500.000$  configurações para calcular as médias. Esses números podem ser reduzidos em função da capacidade do computador. Não há necessidade de números muito altos para se conseguir resultados bons. Como se vê por essas figuras, as simulações reproduzem bastante bem os resultados exatos (que valem no limite de rede infinita).

Avanços notáveis nas simulações de Monte Carlo a tornaram muito mais eficientes que aquelas feitas por Metropolis. Em particular, o recurso de multi-histograma de Ferrenberg e Swendsen [20] reduz consideravelmente o tempo computacional numa simulação e/ou melhora a precisão dos resultados em grandes intervalos de temperatura. A beleza desse método pode se apreciada na Ref. [21] onde as simulações são feitas no modelo de Ising unidimensional.

## V Conclusão

O modelo de Ising é uma aproximação para sistemas reais mais complexos, mas com o grande mérito de ter solução exata, da qual aprendeu-se muito sobre magnetismo e mecânica estatística em geral. Aqui nos restringimos apenas a sua aplicação no ferromagnetismo, comparando a solução exata de Onsager com simulações de Monte Carlo e com a aproximação de campo médio. De *Ising a Metropolis* certamente não contempla todas as idéias importantes do período marcado por esses nomes. Nem apresenta a evolução que delas surgiram. De passagem, técnicas como a da matriz de transferência, ou a de grupo de renormalização, tem lugar garantido entre

as mais importantes.[14] Conceitos como universalidade e expoentes críticos são essenciais em discussões sobre magnetismo.[14]

Apesar do volume imenso de informações presentes na literatura a respeito do modelo de Ising, nem sempre ele é explorado nos cursos de mecânica estatística que acabam sendo excessivamente formais e perdem a chance assim de abordar um modelo interessante. Com os modernos microcomputadores e com linguagem de manipulação simbólica é fácil explorar as diversas aproximações disponíveis para as funções termodinâmicas do modelo. Em resumo, o modelo Ising deve continuar pelo novo milênio como um ótimo *laboratório* tanto no desenvolvimento de novas técnicas, como para apresentação didática de conceitos nem sempre aparentes em outros sistemas mais sofisticados.

### Agradecimentos

Ao Professor J. R. Drugowich de Felício pelas importantes e agradáveis discussões que tivemos em torno desse tema.

### Referências

- [1] E. Ising, Z. Physik **31**, 253 (1925).
- [2] P. Weiss, J. Phys. Radium, Paris **6**, 667 (1907).
- [3] W. Heisenberg Z. Physik **49**, 619 (1928).
- [4] M. J. Oliveira, Phys. Rev. B **48**, 6141 (1993).
- [5] C. N. Yang e T. D. Lee, Phys. Rev. **87**, 404, 410 (1959).
- [6] R. E. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc. **32**, 471 (1936).
- [7] J. G. Kirkwood, J. Chem. Phys. **6**, 70 (1938).
- [8] H. A. Kramers e G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252, 263 (1941).
- [9] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944). Veja também B. Kaufmann, Phys. Rev. **76**, 1232 (1949).
- [10] R. K. Pathria, Statistical Mechanics, International Series in Natural Philosophy, Vol. 45, Pergamon Press 1988.
- [11] H. A. Bethe, Proc. Roy. Soc. London A **150**, 552 (1935).
- [12] V. L. Líbero e N. A. Lima, aceito para publicação no Phys. Rev. B, **61**, fev/2000. Ver também V. L. Líbero e D. L. Cox, Physical Rev. B **48**, 3783 (1993).
- [13] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller e E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [14] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions, Oxford University Press, Oxford, Cap. 7.
- [15] K. Binder e D. W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, Solid-State Sciences 80, Springer-Verlag.
- [16] D. P. Landau, Phys. Rev. B **13**, 2997 (1976).
- [17] S. E. Koonin e Dawn C. Meredith, Computational Physics, Addison-Wesley Publishing Company, 1990.
- [18] Ele garante que  $P(c_k)W(c_k \rightarrow c_l) + P(c_l)W(c_l \rightarrow c_k) = 0$ , que é denominado balanço detalhado.
- [19] K. Kawasaki, Phase Transitions and Critical Phenomena, ed. by C. Domb, M. S. Green, Vol. 2 (Academic, New York 1972) p. 443.
- [20] A. Ferrenberg e R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 (1988).
- [21] J. R. Drugowich de Felício e Valter Luiz Líbero, Am. J. Phys. **64**, 1281 (1996).