

# Termodinâmica do modelo de Ising com interações de alcance infinito via ensemble canônico generalizado

(*Thermodynamics of Ising model with infinite-range interactions by generalized canonical ensemble*)

Leandro G. Rizzi<sup>1</sup> e Rafael B. Frigori<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto,  
Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, SP, Brasil*

<sup>2</sup>*Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Toledo, PR, Brasil*

Recebido em 18/8/2011; Aceito em 17/1/2012; Publicado em 27/2/2012

Apresentamos nesse trabalho a ideia de como ensembles generalizados podem ser utilizados para simplificar operacionalmente o estudo de sistemas físicos não aditivos. Como alternativa aos métodos tradicionais de integração direta ou teoria de campo médio, mostramos como a solução do modelo de Ising com interações de alcance infinito é obtida utilizando um ensemble canônico generalizado. Descrevemos como as propriedades termodinâmicas para esse modelo na presença de um campo magnético externo são encontradas por meio de simples equações paramétricas. Sem prejuízos à interpretação usual, obtemos um comportamento crítico idêntico ao observado nas abordagens tradicionais.

**Palavras-chave:** modelo de Ising, interações de alcance infinito, ensemble canônico generalizado.

In this work we present the idea of how generalized ensembles can be used to simplify the operational study of non-additive physical systems. As alternative of the usual methods of direct integration or mean-field theory, we show how the solution of the Ising model with infinite-range interactions is obtained by using a generalized canonical ensemble. We describe how the thermodynamical properties of this model in the presence of an external magnetic field are founded by simple parametric equations. Without impairing the usual interpretation, we obtain an identical critical behaviour as observed in traditional approaches.

**Keywords:** Ising model, infinite-range interactions, generalized canonical ensemble.

## 1. Introdução

Em geral, a ocorrência de problemas matematicamente inconsistentes, ou apenas intratáveis, impulsiona o desenvolvimento de novos paradigmas teóricos na física, o que se dá muitas vezes pela extensão de formalismos já conhecidos. Consideremos, por exemplo, o aparecimento das estatísticas de Bose-Einstein e Fermi-Dirac na teoria dos ensembles na mecânica estatística [1]. Nesses casos, com o advento do ensemble grande-canônico, foi possível obter as propriedades termodinâmicas de diversos sistemas como gases quânticos não-interagentes a partir de modelos microscópicos [2].

Nas últimas décadas, o desenvolvimento de ensembles generalizados<sup>2</sup> tem constituído uma abordagem promissora no tratamento de uma série de modelos na mecânica estatística [4–9]. Computacionalmente, a

utilização desses ensembles generalizados está ligada à busca de algoritmos de amostragem de configurações (por exemplo, o método de Monte Carlo) mais eficientes [10–13]. O objetivo desse artigo é ilustrar a utilização prática dessas possíveis generalizações. Como motivação, apresentamos pedagogicamente o estudo do modelo de Ising com interações de alcance infinito. Este é um modelo interessante e que exemplifica um sistema não trivial, já que não apresenta aditividade na energia. Além disso, outras duas soluções analíticas, via integração direta ou teoria de campo médio, são conhecidas [14, 15].

Na Seção 2 revisamos os aspectos gerais envolvidos na dedução<sup>3</sup> de uma classe geral de ensembles, baseada no formalismo canônico. No contexto da teoria das flutuações discutiremos brevemente sobre a equivalência entre os ensembles dessa classe e os ensembles usuais

<sup>1</sup>E-mail: lerizzi@usp.br.

<sup>2</sup>Diferentemente da mecânica estatística generalizada de Tsallis [3], essas formulações são consideradas apenas extensões particulares do ensemble canônico.

<sup>3</sup>Essa derivação foi originalmente proposta por R. Toral e pode ser encontrada na Ref. [6].

(canônico e microcanônico). Na Seção 3, além de descrever o modelo de Ising de alcance infinito, discutimos em detalhes como as suas propriedades termodinâmicas são obtidas a partir do formalismo canônico generalizado empregando simples equações paramétricas.

## 2. O ensemble canônico generalizado

Consideramos aqui, sem perda de generalidade, um sistema magnético com  $N$  spins submetido a um campo magnético externo  $H$ . Denotamos por  $|m\rangle$  seus microestados com energia  $E_m$ . Utilizamos o princípio da maximização da função entropia [16]

$$\bar{S} = -k_B \sum_m p_m \ln p_m \quad (1)$$

para encontrar as probabilidades  $p_m$  de cada um dos microestados, onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

Além do vínculo estabelecido pela condição de normalização da distribuição de probabilidade

$$\sum_m p_m = 1,$$

com  $p_m \geq 0$ , escolhemos o vínculo

$$\sum_m p_m \Phi(E_m) = \Phi(\bar{E}), \quad (2)$$

onde  $\Phi(\bar{E})$  é uma função arbitrária da energia<sup>4</sup>  $\bar{E} = \langle \mathcal{H} \rangle$ , com  $\mathcal{H}$  simbolizando o Hamiltoniano do sistema. Note que se  $\langle \mathcal{H} \rangle = \langle \mathcal{H}_{\text{interação}} \rangle - H \langle \mathcal{M} \rangle$  (com  $\mathcal{M}$  sendo o operador magnetização), então  $\bar{E}$  ( $\bar{E} = \bar{U} - H\bar{M}$ ) é igual a entalpia magnética do sistema.<sup>5</sup>

Como solução do problema de maximização obtemos uma distribuição canônica generalizada, cujo peso é dado por

$$p_m = \frac{e^{-\tilde{\beta}\Phi(E_m)}}{\mathcal{Z}}, \quad (3)$$

onde

$$\mathcal{Z}(\tilde{\beta}) = \sum_m e^{-\tilde{\beta}\Phi(E_m)} \quad (4)$$

é a *função de partição generalizada* e  $\tilde{\beta}$  é um multiplicador de Lagrange.

Substituindo a expressão (3) na expressão (2) obtemos

$$\Phi(\bar{E}) = \frac{\sum_m \Phi(E_m) e^{-\tilde{\beta}\Phi(E_m)}}{\sum_m e^{-\tilde{\beta}\Phi(E_m)}},$$

ou, de forma equivalente,

$$\Phi(\bar{E}) = - \left( \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \tilde{\beta}} \right)_{H,N}. \quad (5)$$

<sup>4</sup>Note que o vínculo da expressão (2) implica que  $\langle \Phi(E) \rangle = \Phi(\bar{E})$ .

<sup>5</sup>Muitas vezes esse fato passa despercebido nos livros texto. Para uma discussão detalhada vide Ref. [17].

<sup>6</sup>Isso ocorre apenas se a função  $\Phi(E)$  é crescente.

Analogamente ao que é feito no ensemble canônico tradicional, substituímos o resultado (3) na expressão (1), o que fornece a seguinte expressão para a entropia

$$\bar{S} = k_B \left[ \ln \mathcal{Z} + \tilde{\beta} \Phi(\bar{E}) \right]. \quad (6)$$

Precisamos agora de uma relação entre o parâmetro  $\tilde{\beta}$  e a temperatura absoluta  $T$ . Derivando ambos os lados da Eq. (6) com respeito a  $\bar{E}$  obtemos

$$\left( \frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{E}} \right)_{H,N} = k_B \tilde{\beta} \Phi'(\bar{E}),$$

a qual pode ser comparada com a conhecida relação termodinâmica

$$\frac{1}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)_{H,N},$$

onde  $E$  é a entalpia magnética do sistema [14]. Comparando as duas últimas expressões diretamente obtemos a relação

$$\tilde{\beta} = \frac{1}{k_B T \Phi'(\bar{E})}, \quad (7)$$

a qual permite expressar  $\bar{S}$  e  $\bar{E}$  em termos das variáveis usuais  $T$ ,  $H$  e  $N$ . Vale notar que todas as relações aqui generalizadas reduzem-se às usuais, do ensemble canônico, quando  $\Phi(E) = E$ .

Sendo  $\Phi(E)$  uma função crescente de  $E$ , temos que a função distribuição de probabilidades é um produto da função densidade de estados  $\Omega(E)$  - que cresce rapidamente - e da função  $e^{-\tilde{\beta}\Phi(E)}$  - que decresce rapidamente<sup>6</sup> - ou seja,

$$p(E) = \sum_{E_m=E} p_m = \frac{\Omega(E) e^{-\tilde{\beta}\Phi(E)}}{\mathcal{Z}}, \quad (8)$$

No limite termodinâmico um pico bem pronunciado surge em algum valor  $E = \bar{E}^*$ . A localização desse pico é obtida através da relação

$$\left. \frac{dp(E)}{dE} \right|_{E=\bar{E}^*} = 0,$$

ou seja, quando

$$\left. \frac{d \ln \Omega(E)}{dE} \right|_{E=\bar{E}^*} - \tilde{\beta} \Phi'(\bar{E}^*) = 0.$$

Substituindo a igualdade na Eq. (7) na expressão anterior obtemos

$$\frac{1}{k_B T} = \left. \frac{d \ln \Omega(E)}{dE} \right|_{E=\bar{E}^*}, \quad (9)$$

que é a mesma equação que no ensemble microcanônico define a temperatura como uma função de  $\bar{E}$ , assim, no limite termodinâmico, a função  $\bar{E}^*(T, H, N)$  coincide com a função  $\bar{E}(T, H, N)$  do ensemble microcanônico.

Utilizando a distribuição de probabilidades dada pela expressão (8), calculamos a função de partição a partir da Eq. (6), obtendo assim

$$S = k_B \left\{ \ln \left[ \sum_E \Omega(E) e^{-\tilde{\beta}\Phi(E)} \right] + \tilde{\beta}\Phi(\bar{E}) \right\}.$$

Assumindo que a soma na expressão acima é dominada pelo maior termo, onde  $E = \bar{E}^*$ , chegamos à seguinte expressão

$$\begin{aligned} S &\approx k_B \left\{ \ln \left[ \Omega(\bar{E}^*) e^{-\tilde{\beta}\Phi(\bar{E}^*)} \right] + \tilde{\beta}\Phi(\bar{E}^*) \right\} \\ &\approx k_B \ln \Omega(\bar{E}^*), \end{aligned}$$

em concordância com o ensemble microcanônico.

Para a equivalência com o ensemble canônico tradicional devemos demonstrar que as flutuações

$$\sigma^2[\Phi] = \langle \Phi^2 \rangle - \langle \Phi \rangle^2 = - \left( \frac{\partial \Phi(\bar{E})}{\partial \tilde{\beta}} \right)_{H,N} \quad (10)$$

são negligenciáveis no sentido de que as flutuações relativas anulam-se (i.e.  $\sigma[\Phi]/\langle \Phi \rangle \rightarrow 0$ ) no limite termodinâmico. Como  $\Phi(\bar{E})$  não depende explicitamente de  $\tilde{\beta}$  mas depende da temperatura  $T$ , que por sua vez depende de  $\tilde{\beta}$ , devemos considerar a derivada implícita

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\beta}} = \frac{\partial T}{\partial \tilde{\beta}} \frac{\partial}{\partial T}.$$

Utilizando a igualdade da expressão (7) reescrevemos  $T$  em função de  $\tilde{\beta}$  e  $\Phi'(\bar{E})$ , a partir de onde obtemos:

$$\left( \frac{\partial T}{\partial \tilde{\beta}} \right)_{H,N} = - \left[ \frac{1}{k_B T^2 \Phi'(\bar{E})} + \frac{\Phi''(\bar{E})}{k_B T \Phi'(\bar{E})^2} \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{H,N} \right]^{-1} \quad (11)$$

Efetuada a derivada do lado direito da Eq. (10) teremos

$$\begin{aligned} \sigma^2[\Phi] &= - \left( \frac{\partial T}{\partial \tilde{\beta}} \right)_{H,N} \left( \frac{\partial \Phi(\bar{E})}{\partial T} \right)_{H,N} \\ &= \frac{k_B T^2 \Phi'(\bar{E})^2}{1 + T \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{H,N} \Phi''(\bar{E}) / \Phi'(\bar{E})} \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{H,N}, \end{aligned}$$

onde podemos substituir a definição do calor específico a campo constante  $c_H = N^{-1}(\partial \bar{E} / \partial T)_{H,N}$  para obter

$$\sigma^2[\Phi] = k_B T^2 N c_H \frac{\Phi'(\bar{E})^2}{1 + T N c_H \Phi''(\bar{E}) / \Phi'(\bar{E})}. \quad (12)$$

Essa expressão é geral, portanto, o procedimento de verificação da equivalência de ensembles deve ser executado para cada escolha particular da função  $\Phi(E)$ .

<sup>7</sup>O fator 2 na contribuição da interação de troca foi incluído por uma questão de conveniência nos cálculos e também para manter a notação consistente com a utilizada na Ref. [14].

### 3. O modelo de Ising de alcance infinito

Consideremos um sistema com  $N$  spins de Ising ( $S_i = \pm 1$ ) que interagem por meio de uma interação de troca de alcance infinito. A fim de fornecer um limite termodinâmico bem comportado introduzimos um fator  $1/N$  na interação de troca entre dois spins. Sem isso, a energia associada a interação de um único spin poderia crescer linearmente com o volume da amostra e um limite termodinâmico bem definido seria impossível. Com isso, o fator  $1/N$  garante a extensividade mas não a aditividade do modelo. Também incluímos o caso de interação entre spins com um campo magnético externo  $H$ . Para esse sistema o Hamiltoniano<sup>7</sup> é definido por

$$\mathcal{H} = -\frac{2J}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i. \quad (13)$$

A não-aditividade para esse sistema pode ser verificada considerando o Hamiltoniano da soma de dois de seus subsistemas  $\mathcal{H}_{A+B} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{AB}$ . A presença de termos cruzados, denotados por  $\mathcal{H}_{AB}$ , diferentes de zero, define o que chamamos de sistema não-aditivo.

Considerando a identidade

$$\left( \sum_{i=1}^N S_i \right)^2 = \sum_{i=1}^N S_i^2 + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} S_i S_j,$$

podemos reescrever o primeiro somatório na Eq. (13) como

$$\sum_{1 \leq i < j \leq N} S_i S_j = \frac{1}{2} \left[ \left( \sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - N \right].$$

Dessa maneira o Hamiltoniano pode ser reescrito como

$$\mathcal{H} = J - \frac{J}{N} \left( \sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - H \sum_{i=1}^N S_i,$$

onde completamos quadrados para obter

$$\mathcal{H} = J + \frac{H^2 N}{4J} - \left( \sqrt{\frac{J}{N}} \sum_{i=1}^N S_i + \frac{H}{2} \sqrt{\frac{N}{J}} \right)^2. \quad (14)$$

#### 3.1. Solução no ensemble canônico generalizado

Dado que  $E$  é auto-valor de  $\mathcal{H}$ , escolhemos

$$\Phi(E) = - \left( J + \frac{H^2 N}{4J} - E \right)^{1/2}. \quad (15)$$

Notamos que a função  $\Phi(E)$  é crescente para  $E \in (J - NJ - H, J)$ . Além disso, utilizando a Eq. (12),

é possível mostrar<sup>8</sup> que  $\sigma^2[\Phi]/\langle\Phi\rangle \propto N^{-1/2} \rightarrow 0$  no limite termodinâmico e, conseqüentemente, que essa escolha de  $\Phi(E)$  gera um ensemble canônico generalizado equivalente ao ensemble canônico tradicional.

Utilizando a Eq. (4) obtemos, a partir da Eq. (15), a seguinte função de partição

$$\mathcal{Z} = \sum_{S_1=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} \exp \tilde{\beta} \left( \frac{H}{2} \sqrt{\frac{N}{J}} + \sqrt{\frac{J}{N}} \sum_{i=1}^N S_i \right). \quad (16)$$

Uma vez que estas somas são independentes (i.e. não existem termos cruzados  $S_i S_j$ ) podemos reescrever a Eq. (16) por meio de um produtório da seguinte maneira

$$\mathcal{Z} = \exp \left( \tilde{\beta} \frac{H}{2} \sqrt{\frac{N}{J}} \right) \prod_{i=1}^N \left[ \sum_{S_i=\pm 1} \left( \exp \tilde{\beta} \sqrt{\frac{J}{N}} S_i \right) \right].$$

Somando explicitamente sobre os valores dos spins e efetuando o produtório sobre todos os  $N$  spins, obtemos

$$\mathcal{Z} = \exp \left( \tilde{\beta} \frac{H}{2} \sqrt{\frac{N}{J}} \right) \left[ 2 \cosh \left( \tilde{\beta} \sqrt{\frac{J}{N}} \right) \right]^N. \quad (17)$$

Tomando o logaritmo da função de partição generalizada, dada pela Eq. (17), obtemos a seguinte expressão

$$\ln \mathcal{Z} = \tilde{\beta} \frac{H}{2} \sqrt{\frac{N}{J}} + N \ln \left[ 2 \cosh \left( \tilde{\beta} \sqrt{\frac{J}{N}} \right) \right], \quad (18)$$

que pode ser utilizada para calcular a função  $\Phi(E)$  por meio da expressão (5), ou seja

$$\left( J - E + \frac{H^2 N}{4J} \right)^{1/2} = \frac{H}{2} \sqrt{\frac{N}{J}} + \sqrt{NJ} \tanh \left( \tilde{\beta} \sqrt{\frac{J}{N}} \right). \quad (19)$$

Calculamos  $\tilde{\beta}$  através da Eq. (7) e obtemos a seguinte expressão

$$\tilde{\beta} = \frac{2 \left( J - E + \frac{H^2 N}{4J} \right)^{1/2}}{k_B T}. \quad (20)$$

Então, fazendo a substituição de  $\tilde{\beta}$  na Eq. (19) e multiplicando o resultado por  $1/\sqrt{NJ}$  obtemos

$$\left( \frac{J - E}{NJ} + \frac{H^2}{4J^2} \right)^{1/2} = \frac{H}{2J} + \tanh \left[ \frac{2J}{k_B T} \left( \frac{J - E}{NJ} + \frac{H^2}{4J^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (21)$$

<sup>8</sup>Consideramos aqui que  $\langle\Phi\rangle = \Phi(E)$ , como definido pelo vínculo na expressão (2).

Consideremos a seguinte definição para a constante  $T_c$

$$T_c = \frac{2J}{k_B}, \quad (22)$$

que, de fato, representa a temperatura crítica do modelo relacionada à transição de fase ferromagnética, a qual distingue as fases ordenada (ferromagnética, para  $T < T_c$ ) e desordenada (paramagnética, para  $T > T_c$ ).

Em seguida, efetuamos as seguintes mudanças de variáveis

$$u = \frac{J - E}{NJ}, \quad (23)$$

e

$$h = \frac{H}{2J}. \quad (24)$$

Dessa maneira podemos reescrever a Eq. (21) como

$$(u + h^2)^{1/2} = h + \tanh \left[ \frac{T_c}{T} (u + h^2)^{1/2} \right],$$

então, se fizermos uso da definição

$$x^2 = u + h^2, \quad (25)$$

obteremos uma simples equação transcendental

$$x - h = \tanh \left( \frac{T_c}{T} x \right). \quad (26)$$

Por fim, como visamos o cálculo das grandezas termodinâmicas, escolhemos parametrizar a razão  $T/T_c$ . Para tal, introduzimos a variável

$$\xi = \frac{T_c}{T} x \quad (27)$$

na Eq. (26), de onde obtemos finalmente a seguinte equação paramétrica

$$\frac{T}{T_c} = \frac{\tanh(\xi) + h}{\xi}. \quad (28)$$

### 3.2. Grandezas termodinâmicas

A partir da Eq. (26) e de relações termodinâmicas é possível obter equações paramétricas para grandezas como a entropia, entalpia magnética, calor específico e magnetização em função da variável  $\xi$ . Apresentamos a seguir tal procedimento, utilizando os gráficos para ilustrar o comportamento dessas grandezas em função da razão  $T/T_c$  dada pela expressão (28).

## Entropia

Considerando as seguintes identidades

$$\tilde{\beta}\sqrt{\frac{J}{N}} = \frac{T_c}{T}x \quad \text{e} \quad \tilde{\beta}\frac{H}{2}\sqrt{\frac{N}{J}} = Nh\frac{T_c}{T}x,$$

reescrevemos a Eq. (18) como

$$\ln \mathcal{Z} = Nh\frac{T_c}{T}x + N \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{T_c}{T}x \right) \right]. \quad (29)$$

A partir da definição (15) e da expressão (20) escrevemos

$$\tilde{\beta}\Phi(E) = -N\frac{T_c}{T}x^2. \quad (30)$$

Assim, substituindo as expressões (29) e (30) na Eq. (6) encontramos a entropia do sistema

$$\frac{S}{Nk_B} = \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{T_c}{T}x \right) \right] - \frac{T_c}{T}x(x-h), \quad (31)$$

de onde, com o auxílio da mudança de variável definida pela igualdade (27), obtemos

$$\frac{S}{Nk_B} = \ln [2 \cosh(\xi)] - \xi \tanh(\xi). \quad (32)$$

O gráfico da entropia adimensional  $S/Nk_B$  para diversos valores de  $h$  é mostrado na Fig. 1. Notamos que para  $T > T_c$  a entropia adimensional  $S/Nk_B$  tende para  $\ln 2 = 0,6931\dots$ , valor esperado para um sistema de spins de Ising usual (de dois estados).

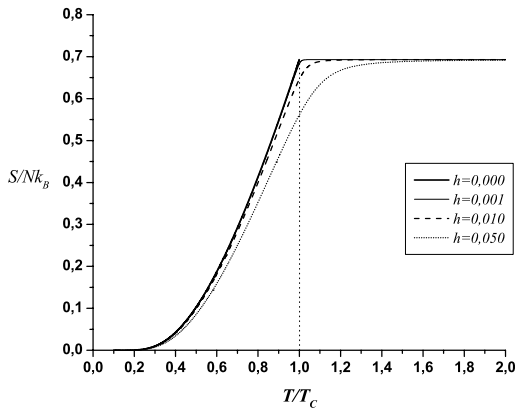


Figura 1 - Entropia adimensional por spin  $S/Nk_B$  em função da razão  $T/T_c$  para diferentes valores do campo magnético adimensional  $h$ .

## Entalpia magnética

Para calcular a entalpia magnética  $E$  do sistema invertemos a expressão (23), que fornece a igualdade  $E = J(1 - Nu)$ , a qual, no limite termodinâmico, é dada como

$$\frac{E}{NJ} = -u. \quad (33)$$

Utilizando a definição na Eq. (27), reescrevemos a expressão

$$u = x^2 - h^2 \quad (34)$$

como

$$u = \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \xi^2 - h^2,$$

onde substituímos a razão  $T/T_c$  dada pela expressão (28), o que resulta em  $u = \tanh^2(\xi) + 2h \tanh(\xi)$ . Finalmente, substituindo esse último resultado para  $u$  na Eq. (33) teremos

$$\frac{E}{NJ} = - [\tanh^2(\xi) + 2h \tanh(\xi)], \quad (35)$$

que, junto com a Eq. (28), fornece o gráfico da entalpia magnética adimensional por spin  $E/NJ$  em função da razão  $T/T_c$  para diversos valores do campo magnético adimensional  $h$ , como mostra a Fig. 2.

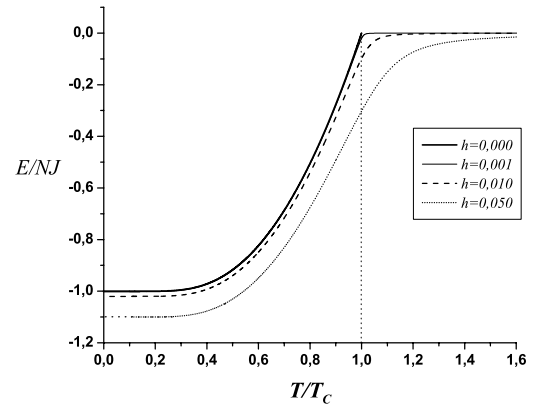


Figura 2 - Entalpia magnética adimensional por spin  $E/NJ$  em função da razão  $T/T_c$  para diversos valores do campo magnético adimensional  $h$ .

## Calor específico

Calculamos o calor específico a campo constante utilizando a seguinte relação da termodinâmica

$$c_H = \frac{C_H}{N} = \frac{1}{N} \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{H,N}.$$

Considerando as Eqs. (33) e (34) temos

$$c_H = -J \left( \frac{\partial u}{\partial T} \right)_{H,N} = -J \left( \frac{\partial x^2}{\partial T} - \frac{\partial h^2}{\partial T} \right)_{H,N}.$$

Como o campo  $H$  é constante e não depende de  $T$ , reescrevemos  $c_H$  como

$$c_H = -2Jx \left( \frac{\partial x}{\partial T} \right)_{H,N}. \quad (36)$$

Derivando os dois lados da Eq. (26) em relação a variável  $T$  obtemos

$$\left(\frac{\partial x}{\partial T}\right)_{H,N} = \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{T}{T_c}x\right)} \left[-\frac{T_c}{T^2}x + \frac{T_c}{T}\left(\frac{\partial x}{\partial T}\right)_{H,N}\right],$$

onde podemos isolar  $(\partial x/\partial T)_{H,N}$ , o que resulta em

$$\left(\frac{\partial x}{\partial T}\right)_{H,N} = -\frac{T_c}{T^2} \frac{x}{\left[\cosh^2\left(\frac{T}{T_c}x\right) - \frac{T_c}{T}\right]}. \quad (37)$$

Então, substituindo  $(\partial x/\partial T)_{H,N}$  da Eq. (37) na Eq. (36) obtemos

$$c_H = 2J \frac{T_c}{T^2} \frac{x^2}{\left[\cosh^2\left(\frac{T}{T_c}x\right) - \frac{T_c}{T}\right]}. \quad (38)$$

Por fim, fazendo uso da definição (22) e das igualdades (27) e (28), reescrevemos a equação acima como

$$\frac{C_H}{Nk_B} = \frac{\xi^2}{\left[\cosh^2(\xi) - \frac{\xi}{\tanh(\xi)}\right]}, \quad (39)$$

que é uma equação paramétrica para o calor específico a campo constante. Na Fig. 3 apresentamos o gráfico para o calor específico  $C_H/Nk_B$  em função da razão  $T/T_c$  para diferentes valores do campo magnético adimensional  $h$ .

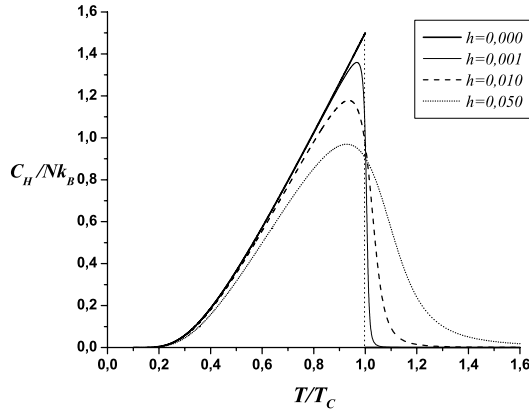


Figura 3 - Calor específico  $C_H/Nk_B$  em função da razão  $T/T_c$  para diferentes valores do campo magnético adimensional  $h$ .

## Magnetização

Para o cálculo da magnetização do sistema, consideramos a energia livre de Gibbs dada por  $G(T, H) = E(S, H) - TS$ , de onde extraímos a seguinte relação:

$$\begin{aligned} M &= -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_{T,N} \\ &= -\left[\left(\frac{\partial E}{\partial H}\right)_{T,N} - T\left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_{T,N}\right]. \end{aligned} \quad (40)$$

Lembrando que a derivada parcial em  $H$  é escrita em termos de  $h = H/2J$  como  $(2J)^{-1}\partial/\partial h$ .

Partindo da entalpia magnética  $E$  dada pela Eq. (33) e considerando  $u$  definido como na expressão (34), calculamos

$$\left(\frac{\partial E}{\partial H}\right)_{T,N} = N \left[h - x \left(\frac{\partial x}{\partial h}\right)_{T,N}\right]. \quad (41)$$

O segundo termo da Eq. (40) é obtido utilizando a entropia  $S$  dada pela Eq. (31), ou seja,

$$\begin{aligned} T \left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_{T,N} &= \frac{T}{2J} \left(\frac{\partial S}{\partial h}\right)_{T,N} \\ &= N \frac{T}{T_c} \frac{\partial}{\partial h} \left\{ \ln \left[ 2 \cosh\left(\frac{T}{T_c}x\right) \right] - \frac{T_c}{T} x(x-h) \right\} \\ &= N \left\{ \left[ \tanh\left(\frac{T}{T_c}x\right) - 2x + h \right] \left(\frac{\partial x}{\partial h}\right) + x \right\}, \end{aligned}$$

onde podemos substituir a identidade (26), o que resulta em

$$T \left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_{T,N} = N \left[x - x \left(\frac{\partial x}{\partial h}\right)_{T,N}\right]. \quad (42)$$

Substituindo os resultados das Eqs. (41) e (42) na expressão (40) chegamos a

$$m = \frac{M}{N} = x - h. \quad (43)$$

que, a partir da expressão (26), pode ser reescrita como

$$m = \tanh\left(\frac{T}{T_c}x\right). \quad (44)$$

Finalmente, considerando a mudança de variável (27), obtemos a equação paramétrica para a magnetização  $m = \tanh(\xi)$ , utilizada para obter o gráfico apresentado na Fig. 4.

Notamos que, pela Eq. (43) obtemos a relação  $x = m + h$ , que pode ser substituída na Eq. (44), fornecendo

$$m = \tanh\left[\frac{T_c}{T}(m+h)\right]. \quad (45)$$

Esta é exatamente a equação transcendental encontrada para esse modelo através das abordagens usuais, seja ela a teoria de campo médio ou a integração direta da função de partição (vide Ref. [14]). A partir dela é possível obter todos os expoentes críticos de maneira análoga à usual e tirar conclusões sobre a sua classe de universalidade [14, 15].

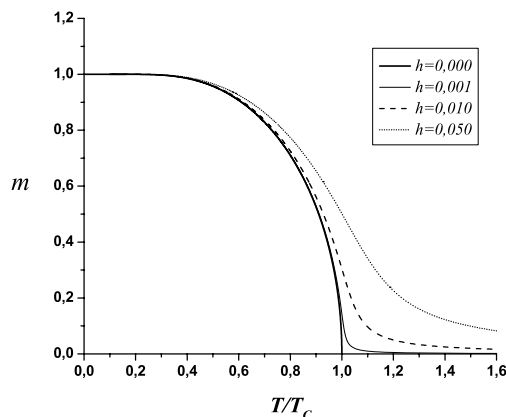


Figura 4 - Magnetização por spin  $m$  em função da razão  $T/T_c$  para diferentes valores do campo magnético adimensional  $h$ .

#### 4. Conclusões

Revisamos aqui o conceito de que é possível construir uma classe de ensembles canônicos generalizados, os quais podem ser utilizados em abordagens alternativas para solucionar problemas na mecânica estatística. Utilizando um ensemble particular dessa classe de ensembles canônicos generalizados, obtivemos a solução do modelo de Ising com interação de alcance infinito de maneira simples, isto é, sem utilizar a integração da função de partição via ponto de sela ou argumentos da teoria de campo médio. Além disso, apresentamos um procedimento via equações paramétricas que permite a caracterização de propriedades termodinâmicas tanto analiticamente quanto visualmente, o que pode ser útil em estudos de outros modelos, especialmente aqueles que não apresentam aditividade.

#### Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer aos professores Alexandre S. Martinez e Nelson A. Alves pelas discussões realizadas e à CAPES pelo fomento.

#### Referências

- [1] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1996), 2<sup>a</sup> ed.
- [2] Sistemas tais como gás de elétrons (modelo de Sommerfeld para condutividade), de fótons (distribuição de Plank e lei de Stephan-Boltzmann), de fônons; condensado de Bose-Einstein; etc. Vide Capítulo 4 do livro de D. Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics* (Oxford University Press, Nova Iorque, 1987).
- [3] C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988).
- [4] J.H. Hetherington, *J. Low Temp. Phys.* **66**, 145 (1987); J.H. Hetherington and D.R. Stump, *Phys. Rev. D* **35**, 1972 (1987).
- [5] R.S. Johal, A. Planes and E. Vives, *Phys. Rev. E* **68**, 056113 (2003).
- [6] R. Toral, *Physica A* **365**, 85 (2006).
- [7] M. Costeniuc, R.S. Ellis, H. Touchette and B. Turkington, *J. Stat. Phys.* **119**, 1283 (2005).
- [8] M. Costeniuc, R.S. Ellis, H. Touchette and B. Turkington, *Phys. Rev. E* **73**, 026105 (2006).
- [9] R.B. Frigori, L.G. Rizzi and N.A. Alves, *Eur. Phys. J. B* **75** 311 (2010).
- [10] J.V. Lopes, M.D. Costa, J.M.B.L. dos Santos and R. Toral, *Phys. Rev. E* **74**, 046702 (2006);
- [11] T. Neuhaus and J.S. Hager, *Phys. Rev. E* **74**, 036702 (2006).
- [12] T. Morishita and M. Mikami, *J. Chem. Phys.* **127**, 034104 (2007).
- [13] J. Kim, T. Keyes and J.E. Straub, *J. Chem. Phys.* **132**, 224107 (2010).
- [14] H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1971).
- [15] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher and M.E. Newman, *The Theory of Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1999).
- [16] Vide Seção 6.10 do livro F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (McGraw Hill, 1965).
- [17] G. Castellano, *J. Magn. Magn. Mater.* **260**, 146 (2003).