Fernando de Almeida Passos   nº USP: 9796954

9,5

1ª Provinha de Mecânica-Estatística

Considere um íon paramagnético na presença de um campo magnético H. O íon é permitido estar apenas na direção paralela ou antiparalela ao campo magnético, onde em cada caso (estado microscópico), podemos associar uma energia $E_i = -H\sigma_i$, onde $\sigma_i = 1$ (paralelo) ou -1 (antiparalelo). A distribuição de probabilidade associada a cada estado é dada por $P(\sigma_i) = e^{-\beta E_i}/\zeta$, com $\beta = 1/(k_B T)$ sendo k_B a constante de Boltzmann.

a) Ache a expressão para $\zeta(\beta, H)$.

b) Calcule a energia média $\langle E_i \rangle$ do íon e faça um gráfico de $\langle E_i \rangle$ versus T.

c) Obtenha uma expressão para a variância $\chi = \langle \sigma_i^2 \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2$.

a) Como a soma de todos probabilidades deve ser 1:

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} P(\sigma_i) = 1 \Rightarrow \sum_{i=1}^{N} \frac{e^{-\beta E_i}}{\zeta} = 1 \Rightarrow \boxed{\zeta = \sum_{i=1}^{N} e^{-\beta E_i} = \sum_{i=1}^{N} e^{\beta H \sigma_i}}$$

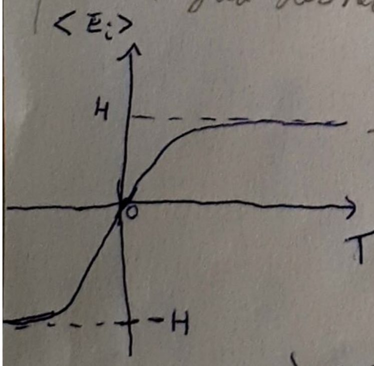
ou ainda, ~~como~~ só há um íon e duas possibilidades para σ_i:

$$\boxed{\zeta = e^{\beta H} + e^{-\beta H} = 2\cosh(\beta H)}$$

b)
$$\langle E_i \rangle = \sum_{i=1}^{N} \frac{E_i e^{-\beta E_i}}{\zeta} = -\frac{1}{\zeta} \frac{\partial \big(\overbrace{\sum_i e^{-\beta E_i}}^{\zeta}\big)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\zeta}\frac{\partial \zeta}{\partial \beta} = \boxed{-\frac{\partial (\ln \zeta)}{\partial \beta}} = \langle E_i \rangle$$

ou ainda,
$$\langle E_i \rangle = -\frac{1}{\zeta}\frac{\partial \zeta}{\partial \beta} = -\frac{\cancel{2H}\,\mathrm{senh}(\beta H)}{2\cosh(\beta H)} = \boxed{\cancel{-H}\tanh(\beta H) = \langle E_i \rangle}$$

Região desnecessária.



Esqueceu do fator de $-H$

c)
$$\langle \sigma_i \rangle = \sum_i \frac{\sigma_i e^{\beta H \sigma_i}}{\zeta} = \frac{1}{\zeta \beta}\frac{\partial \left(\sum_i e^{\beta H \sigma_i}\right)}{\partial H} = \frac{1}{\zeta \beta}\frac{\partial \zeta}{\partial H} = \boxed{K_B T \frac{\partial (\ln \zeta)}{\partial H}}$$

ou
$$\langle \sigma_i \rangle = K_B T \beta \frac{2\,\mathrm{senh}(\beta H)}{2\cosh(\beta H)} = \tanh(\beta H)$$

$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \sum_i \sigma_i^2 \frac{e^{\beta H \sigma_i}}{\zeta} = \boxed{\frac{1}{\zeta \beta^2}\frac{\partial^2 \zeta}{\partial H^2}}$$

ou
$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2}\beta^2 \frac{2\cosh(\beta H)}{2\cosh(\beta H)} = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{\chi = 1 - \tanh^2(\beta H)}$$