2^a Provinha de Mecânica-Estatística

A energia de um sistema de N íons magnéticos localizados a temperatura T na presença de uma campo cristalino D pode ser escrita na forma $\mathcal{H} = D\sum_{i=1}^{N} S_i^2$, onde $D > 0$ e a variável S_i pode assumir os valores $-1, 0$ ou $+1$, para qualquer sítio i.

a) Obtenha a função de partição $Z(T, D)$ do sistema.

b) Obtenha expressões para a energia interna, energia livre de Helmholtz e entropia por sítio. Esboce gráficos da energia interna e entropia nos limites $T \to 0$ e $T \to \infty$.

c) Calcule o valor esperado do "momento de quadrupolo" $q = \frac{1}{N}\langle\sum_{i=1}^{N} S_i^2\rangle$ em função de D e da temperatura.

a) $\zeta = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H_i} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta D S_i^2}$

Os valores possíveis para S_i^2 são 0 ou 1

$\Rightarrow \zeta = e^{-\beta D 0} + e^{-\beta D 1} \Rightarrow \zeta = (1 + 2e^{-\beta D})$

Logo, $Z = \zeta^N \Rightarrow \boxed{Z(T,D) = (1+2e^{-\beta D})^N}$, onde $\beta = \frac{1}{K_B T}$ ✓× 1

b) $U = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{-1}{(1+e^{-\beta D})^N} N(1+e^{-\beta D})^{N-1}(-De^{-\beta D})$

$U = \frac{NDe^{-\beta D}}{(1+e^{-\beta D})} \Rightarrow \boxed{u = \frac{U}{N} = \frac{2De^{-\beta D}}{(1+2e^{-\beta D})}}$ ✓× 0,5

$F = -K_B T \ln(1+e^{-\beta D})^N = -NK_B T \ln(1+e^{-\beta D})$

$\boxed{f = \frac{F}{N} = -K_B T \ln(1+2e^{-\beta D})}$ ✓× 0,5

$\boxed{s = \frac{2De^{-\beta D}}{T(1+2e^{-\beta D})} + K_B \ln(1+2e^{-\beta D})}$ ✓× 0,5

b) p/ $T \to 0$ ou $\beta \to \infty$:

$e^{-\beta D} << 1 \Rightarrow$ ~~$e^{-\beta D} \approx 1 - \beta D$~~

$e^{-\beta D} \to 0$

$\Rightarrow u \approx 0$

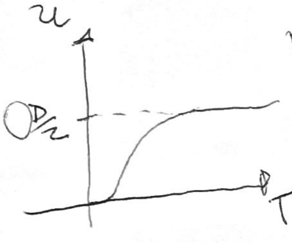
e $s \approx 0$ (pois $e^{-\beta D}$ vai à zero mais rápido que $\frac{1}{T}$)

p/ $T \to \infty$ ou $\beta \to 0$

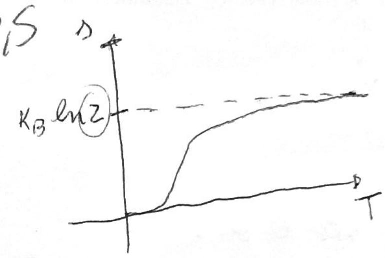
$e^{-\beta D} \approx 1 - \beta D \approx 1$

$\Rightarrow u \approx \dfrac{D(1-\beta D)}{(2-\beta D)} \approx \dfrac{D}{2}$

$s \approx k_B \ln(\cancel{2}\,1 - \beta D) \approx k_B \ln 2$



0,5



0,5

c) $q = \dfrac{1}{N} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i^2 \dfrac{e^{-\beta D \sigma_i^2}}{Z}$, onde $\sigma_i^2 = \sum_{i=1}^{N} S_i^2$

$\Rightarrow q = \dfrac{-1}{ZND} \sum_{\{\sigma_i\}} \dfrac{\partial}{\partial \beta}(e^{-\beta D \sigma_i^2}) = -\dfrac{1}{ND}\dfrac{\partial Z}{\partial \beta} = -\dfrac{1}{NDZ} N(1+e^{-\beta D})^{N-1}(-De^{-\beta D})$

$\Rightarrow \boxed{q = \dfrac{e^{-\beta D}}{(1+e^{-\beta D})}}$, $\beta = 1/k_B T$

1,5