Estructura de la Materia 2
Segundo cuatrimestre de 2020
Guía 8: Magnetismo

1. Considere una capa atómica de momento angular l, que cuenta con $2l+1$ estados orbitales y dos estados de espín por orbital. Suponiendo que esta capa se llena con n electrones, derive, a partir de las reglas de Hund, una fórmula general para S, L, y J en función de l y n. A partir de la misma, determine S, L y J para átomos aislados de azufre (S), vanadio (V), zirconio (Zr), xenón (Xe), y disprosio (Dy).

2. Dado el Hamiltoniano para un sistema de espines no interactuantes $\mathscr{H} = \tilde{g}\mu_B \mathbf{H}\cdot\mathbf{J}$

   a) Determine la magnetización del sistema como función de H y T.

   b) Demuestre que la susceptibilidad del sistema está dada por:

   $$\chi = \frac{n(\tilde{g}\mu_B)^2}{3}\frac{J(J+1)}{k_B T}$$

   donde $\tilde{g}$ es el factor de Landé y n la densidad de espines.

3. A 2000 K, el Manganeso (Mn, número atómico = 25) forma un vapor atómico con presión de vapor de 10^5 Pa, que puede modelarse como un gas ideal.

   a) Determine S, L, y J para un átomo aislado de Mn a partir de las reglas de Hund, y calcule luego la contribución paramagnética a la susceptibilidad de Curie del gas a 2000 K.

   b) Además de la susceptibilidad de Curie, el átomo de Mn tendrá una contribución diamagnética debido a las capas llenas más profundas. Asumiendo un radio atómico de 1Å, estime el diamagnetismo de Larmor para el gas a 2000 K.

4. Considere el siguiente Hamiltoniano de Heisenberg para espines 1/2 dispuestos en una red cúbica:

   $$\mathscr{H} = \frac{-J_{int}}{2}\sum_{<i,j>}\mathbf{S_i}\cdot\mathbf{S_j} + g\mu_B\mathbf{H}\sum_i \mathbf{S_i}$$

   donde la constante de intercambio es $J_{int} > 0$ (ferromagneto) y la primera sumatoria corre sobre primeros vecinos en la red cúbica.

   a) Asumiendo que el campo $\mathbf{H}$ se encuentra aplicado en la dirección $\hat{z}$, derive la ecuación de autoconsistencia para el momento magnético por sitio (m) en la aproximación de campo medio de Weiss.

   b) En el límite de altas temperaturas, encuentre la susceptibilidad χ ¿Cómo se compara con el caso paramagnético? ¿Cuál es la temperatura crítica (T_C) del sistema?

   c) Muestre gráficamente, que en ausencia de campo magnético externo, existen soluciones con $m \neq 0$ a $T < T_C$.

   d) Repita los incisos *a*) y *b*) asumiendo $S = 1$ en cada sitio.

5. Considere un sistema de espines 1/2 dispuestos en una red cúbica, con constante de intercambio $J_{int} < 0$ (antiferromagneto), sobre el cual se aplica un campo magnético externo $\mathbf{H}$ en la dirección $\hat{z}$.

   a) Modelando al sistema como 2 subredes, A y B, que describen sitios alternos de la red, derive las ecuaciones de autoconsistencia para los momentos magnéticos por sitio m_i $(i = A, B)$ en la aproximación de campo medio de Weiss.

   b) Considere la siguiente expresión para la susceptibilidad χ del sistema:

   $$\chi = \frac{n}{2} \lim_{H\to 0} \frac{\partial(m_A + m_B)}{\partial H} = -\frac{n}{2} g\mu_B \lim_{H\to 0} \frac{\partial(s_A + s_B)}{\partial H}$$

   donde n es la densidad de espines y s_i $(i = A, B)$ es el valor medio de espín por sitio para la subred i $(m_i = -g\mu_B s_i)$.

   (I) En el límite de altas temperaturas, derive la susceptibilidad del sistema y determine la temperatura crítica (T_C) ¿Cómo se compara con los casos ferromagnético y paramagnético?

   (II) Demuestre que la susceptibilidad del sistema para $T < T_C$ resulta:

   $$\chi = \frac{(n/4)(g\mu_B)^2(1-(2s)^2)}{k_B T + k_B T_C(1-(2s)^2)}$$

   donde $s = s(T) = |s_A(T)| = |s_B(T)|$

   (III) A partir de lo calculado en (I) y (II), grafique χ versus T a toda T.

6. Considere una red cuadrada con espines 1/2 y 1 ubicados en sitios alternos, con interacción únicamente a primeros vecinos. Modelando al sistema como dos subredes A y B, los Hamiltonianos de campo medio para un sitio de la subred A, y un sitio de la subred B, pueden escribirse de la siguiente manera:

   $$\mathscr{H}_{i,A} = \mathbf{S_i} \cdot [-J_{int} \sum_j < \mathbf{S_{j,B}} > + g\mu_B \mathbf{H}]$$

   $$\mathscr{H}_{i,B} = \mathbf{S_i} \cdot [-J_{int} \sum_j < \mathbf{S_{j,A}} > + g\mu_B \mathbf{H}]$$

   donde las sumatorias actúan sobre primeros vecinos de los sitios considerados. J_{int} es la constante de intercambio y $\mathbf{H}$ el campo magnético externo, que puede considerarse aplicado en la dirección $\hat{z}$.

   a) Derive las ecuaciones de autoconsistencia para los momentos magnéticos por sitio m_i $(i = A, B)$ en la aproximación de campo medio de Weiss, y expándalas a primer orden para el caso de temperaturas altas.

   b) A partir del resultado que obtuvo en el inciso anterior para temperaturas altas, demuestre que la magnetización del sistema en esta aproximación resulta:

$$M = \frac{n}{2}(m_A + m_B) = \frac{n(g\mu_B)^2\beta[11 + 4\beta J_{int}z]}{24 - 4\beta^2 J_{int}^2 z^2} H$$

donde $\beta = (k_B T)^{-1}$, n es la densidad de espines, y z es el número de primeros vecinos.

(I) Determine la susceptibilidad magnética del sistema, y escríbala en términos de su temperatura crítica (T_C). ¿Qué valor toma T_C en el caso de $J_{int} > 0$? ¿Y en el caso de $J_{int} < 0$?

(II) Describa el comportamiento de la susceptibilidad a medida que T se acerca a T_C ¿En qué se diferencian los casos de $J_{int} > 0$ y $J_{int} < 0$? Justifique claramente.

c) Suponga ahora que el sistema se encuentra a temperatura nula y en ausencia de campo magnético externo. ¿Cuál espera que sea la magnetización total del sistema en los casos de $J_{int} > 0$ y $J_{int} < 0$? Explique.

7. En la teoría de campo medio para un ferromagneto de espin 1/2 la magnetización está dada por:

   $M = N g\mu_B \frac{1}{2} \tanh(x)$

   con:

   $x = g\mu_B \frac{1}{2}(H + \lambda M)/k_B T$; $\lambda = \frac{Jz}{N(g\mu_B)^2}$

   Demostrar que:

   a) Para $T << T_c$, la magnetización espontánea se aparta de su valor de saturación ($M(T = 0)$) exponencialmente en $-1/T$.

   b) Para $T = T_c$ la magnetización $M(H,T)$ se anula como $H^{1/3}$ (experimentalmente se obtiene $\sim 1/5$).

   c) Muestre que cuando T se aproxima por debajo a T_c ($T \to T_c^-$) la magnetización espontánea se desvanece como $(T_c - T)^{1/2}$.

8. Se tiene una red atómica cuadrada de parámetro de red a, que puede ser descripta por un Hamiltoniano de enlaces fuertes con constante de salto t a primeros vecinos, y una interacción adicional de Hubbard de la forma:

   $$\mathcal{H}_{Hubbard} = U \sum_i N_\uparrow^i N_\downarrow^i$$

   donde $U \geq 0$ y N_σ^i es el número de electrones de espín σ en el sitio i.

   a) Calcule el valor esperado para la energía de interacción de Hubbard. Para ello describa a las densidades de espines en la banda como $n_\uparrow^i = (n/2)(1+\alpha)$ y $n_\downarrow^i = (n/2)(1-\alpha)$, donde n es la densidad de electrones, y α determina la proporción de cada población de espín ($0 \leq \alpha \leq 1$).

   b) Sabiendo que la energía cinética proveniente de la contribución de enlaces fuertes es de la forma $K = C(1+\alpha^2)$, donde la constante de salto t fue absorbida en la constante C, determine el valor mínimo que debe tomar U para que el sistema sea ferromagnético ¿Qué valor adquiere α en ese caso? ¿Cuánto vale la magnetización del sistema?

Nota: La expresión provista para K fue derivada asumiendo una densidad n suficientemente baja en la banda como para describirla en aproximación parabólica.

c) Suponga ahora que tiene exactamente un electrón por sitio contribuyendo al problema, y que el término de interacción U es suficientemente grande como para impedir, a primer orden, el salto entre sitios vecinos. En este caso, puede determinar la diferencia de energía entre el estado ferromagnético y antiferromagnético agregando perturbativamente a segundo orden el término de salto entre sitios ¿Cuál presenta menor energía?

9. Se tiene un material ferromagnético con una densidad ρ de espines, cada uno con momento magnético μ_B.

   a) Suponga que la forma del material es una varilla cilíndica de radio r y longitud L, con $L >> r$. En ausencia de campo magnético externo, si todos los momentos están alineados a lo largo del eje de la varilla, calcule la energía magnética del ferromagneto. (Ayuda: un volumen de dipolos magnéticos alineados es equivalente a una densidad de monopolos magnéticos sobre su superficie.)

   b) Calcule nuevamente la energía magnética suponiendo ahora que $r >> L$.

   c) Si se introduce una pared de dominio en el ferromagneto, dónde espera que aparezca la pared para minimizar la energía magnética en las dos geometrías de los items anteriores. Estime cuánto cambia la energía magnética por la presencia de la pared de dominio.

   d) Suponga que los espines en el material están dispuestos sobre una red cúbica, que la energía de intercambio entre primeros vecinos es J y que la energía de anisotropía es mucho mayor que la de intercambio. Calcule la energía que me cuesta formar una pared de dominio. A partir de la comparación con la energía magnética, en cuál de las dos geometrías espera encontrar paredes de dominio?

   e) Para la magnetita, la energía de intercambio es $JS^2/a = 1.33\ 10^{-11}$ J/m y la energía de anisotropía es $\kappa S^2/a^3 = 1.35\ 10^4$ J/m^3, con a el parámetro de red. Estime el ancho de la pared de dominio y su energía por unidad de área.