

## Estructura de la Materia 2

### Guía a Magnetismo

1. (a) Muestre que la magnetización  $M$  de un conjunto de  $N$  átomos independientes de momento angular total  $J$ , en equilibrio a temperatura  $T$ , está dado por

$$M = Ng_J\mu_B JB_J(y) \quad (1)$$

donde  $y = g_J\mu_B JB/k_B T$ ,  $B$  es el campo magnético,  $g_J$  es el factor de Landé, y  $B_J(y)$  es la función Brillouin

$$B_J(y) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}y\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{y}{2J}\right) \quad (2)$$

(b) En la Figura 1 se muestra el momento magnético por ion  $m$  en función de  $B/T$  para las sales paramagnéticas  $\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{Cr}^{3+}$ ),  $\text{NH}_4\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{Fe}^{3+}$ ) y  $\text{Gd}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{Gd}^{3+}$ ). Mostrar que para altos y bajos valores de  $B/T$ , la expresión dada en 1 y 2 ajusta a los datos.

(c) La capa  $3d$  de los iones libres de  $\text{Cr}^{3+}$  y  $\text{Fe}^{3+}$  contienen 3 y 5 electrones, respectivamente, mientras que la capa  $4f$  del  $\text{Gd}^{3+}$  contiene 7. Usando las reglas de Hund, calcule los valores de  $S$ ,  $L$ ,  $J$  y  $g_J$  para cada ion. Muestre que los valores que obtiene reproducen lo que se infiere de los experimentos para el  $\text{Fe}^{3+}$  y el  $\text{Gd}^{3+}$ , *pero no* para el  $\text{Cr}^{3+}$ . Infiera de los datos el valor correcto de  $g_J$  y la configuración del estado fundamental para este último, y explique la discrepancia con los valores que calculó antes.

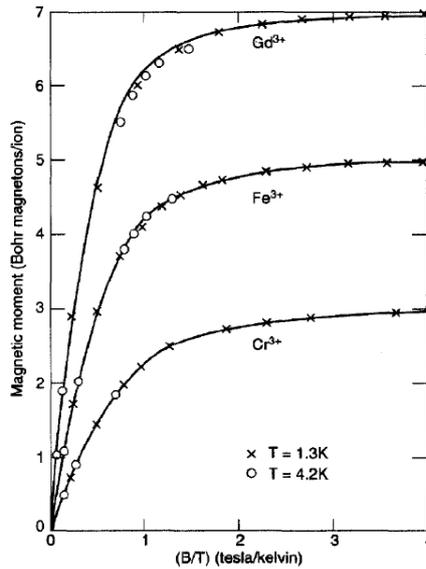


Figura 1: Momento magnético por ion en función de  $B/T$  para distintas sales paramagnéticas.

2. El Hamiltoniano de Ising para espín  $1/2$  es

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J \sigma_i \sigma_j + g \mu_B B \sum_i \sigma_i \quad (3)$$

donde  $J > 0$  y  $\sigma = \pm 1/2$  es la componente  $z$  del espín y el campo magnético  $B$  se aplica en la dirección  $z$ . Los índices  $i, j$  denotan sitios de una red. En la aproximación de campo medio y considerando  $z$  vecinos para cada sitio:

- Obtenga la ecuación trascendente cuya solución da el valor medio  $\langle \sigma \rangle$ .
- Suponga  $B = 0$ . Resuélva gráficamente (o numéricamente) la ecuación resultante para distintos valores de la temperatura y encuentre el valor medio de la magnetización por sitio.
- Suponga  $B = 0$ . Encuentre la temperatura crítica (nota: para esto, use un desarrollo de Taylor a primer orden (¿Qué parámetro del problema determina la escala de energía?).
- Ahora suponga que  $B$  es distinto de cero pero chico, y la temperatura es alta. Calcule la susceptibilidad del sistema y demuestre que se obtiene la ley de Curie-Weiss.

3. El Hamiltoniano de Hubbard se escribe

$$H = H_0 + H_{int} \quad (4)$$

donde  $H_0$  corresponde a un modelo tight-binding y

$$H_{int} = \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (5)$$

describe la interacción entre electrones en un sitio  $i$  de la red, con  $U > 0$ .  $n_{i\uparrow}$  ( $n_{i\downarrow}$ ) es el número de electrones con espín *up* (*down*) en el sitio  $i$ .

A partir del modelo de Hubbard en la aproximación de campo medio:

(a) Calcule el valor medio del Hamiltoniano de interacción en términos del número medio de electrones por sitio. Esto es el valor medio de la energía potencial que gana el sistema de electrones al alinear sus espines.

(b) Calcule el valor medio de la energía cinética que cuesta polarizar los espines del sistema (nota: recuerde la susceptibilidad de Pauli).

(c) A partir de (a) y (b), obtenga el criterio de Stoner. Discuta los casos del Ni, Fe, Co, y el fenómeno de *susceptibilidad de Pauli intensificada* observado en Pt y Pd. (Nota: En relación a la derivación estándar del criterio de Stoner a partir del desdoblamiento de bandas, tenga en cuenta que el parámetro de Stoner  $I$  puede identificarse con  $U$ ).

4. A partir del Hamiltoniano de Heisenberg en una dimensión con interacciones a primeros vecinos, calcule la relación de dispersión de ondas de espín. Realice el cálculo de dos maneras (el resultado es el mismo):

(a) En la aproximación semiclásica.

(b) Cuánticamente.

(c) Muestre que la reducción de la magnetización de un ferromagneto debido a las ondas de espín es proporcional a  $T^{3/2}$  (esto implica que la contribución al calor específico de los magnones es  $\propto T^{3/2}$ , que se conoce como ley  $T^{3/2}$  de Bloch). Explique físicamente por qué espera que la magnetización del ferromagneto disminuya por culpa de las ondas de espín.

(d) La relación de dispersión de las ondas de espín puede medirse usando *scattering inelástico* de neutrones. La energía del neutrón que incide cambia de  $E = \hbar k^2/2m_n$  a  $E' = \hbar k'^2/2m_n$ , porque el *scattering* produce una excitación (magnón) con energía  $\hbar\omega$  y vector de onda  $\vec{q}$ . Conservación de energía-momento da  $E = E' + \hbar\omega$  y  $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{q} + \vec{G}$  (donde  $\vec{G}$  es un vector de la red recíproca). Entonces, midiendo  $\vec{k}, \vec{k}'$  y  $E, E'$  es posible determinar  $\omega$  y  $\vec{q}$ . Compare lo que obtuvo en (a) y (b) con la relación de dispersión medida para  $\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$  mostrada en la Figura 2.

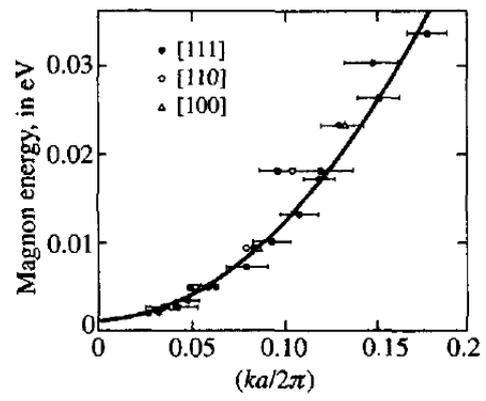


Figura 2: Relación de dispersión de magnones en  $\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ .