Estructura de la Materia 2
Segundo cuatrimestre de 2019
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. 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:

   $$\mathscr{H}_{Hubbard} = U \sum_i N^i_\uparrow N^i_\downarrow$$

   donde $U \geq 0$ y N^i_σ 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 $n^i_\uparrow = (n/2)(1+\alpha)$ y $n^i_\downarrow = (n/2)(1-\alpha)$, 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?