Ampliación de Física del Estado Sólido

Relación 4: Sistemas con orden magnético

Juan J. Meléndez

Problema 4.1

La contribución predominante al ferromagnetismo del sulfato de cobre se asocia a los iones Cu^{2+}, con una configuración "bloqueado" $[LSJ] = \left[\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}\right]$ y $g_J = 2$. Demostrar que la imanación de un conjunto de n iones Cu^{2+} por unidad de volumen en el seno de un campo magnético B está dada por:

$$M = n\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

Un momento angular (típicamente, el espín) está "bloqueado" si el factor giromagnético que se observa no es el esperado teóricamente. Por ejemplo, en nuestro caso, $J = L = \frac{1}{2}$ corresponde teóricamente a $g_J = 1$, pero el factor giromagnético observado es $g_J = 2$.

La imanación asociada al conjunto de n iones Cu^{2+} por unidad de volumen en el seno de un campo magnético B es

$$M = n g_J \mu_B J B_J(\beta), \tag{1}$$

donde g_J es el factor giromagnético y

$$B_J(\beta) = \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J}\beta - \frac{1}{2J} \coth \frac{\beta}{2J},$$

con $\beta = \frac{g_J \mu_B J B}{k_B T}$, es la *función de Brillouin* de orden J. En nuestro caso, para $J = \frac{1}{2}$, es

$$\beta = \frac{\mu_B B}{k_B T}$$

y

$$B_{1/2}(\beta) = 2 \coth 2\beta - \coth \beta$$

Pero

$$\begin{aligned} 2\coth 2\beta - \coth\beta &= \frac{2\left(e^{2\beta} + e^{-2\beta}\right)}{e^{2\beta} - e^{-2\beta}} - \frac{e^{\beta} + e^{-\beta}}{e^{\beta} - e^{-\beta}} = \\ = \frac{2(e^{2\beta} + e^{-2\beta}) - \left(e^{\beta} + e^{-\beta}\right)^2}{e^{2\beta} - e^{-2\beta}} &= \frac{e^{2\beta} + e^{-2\beta} - 2}{e^{2\beta} + e^{-2\beta}} = \\ = \frac{\left(e^{\beta} - e^{-\beta}\right)^2}{\left(e^{\beta} + e^{-\beta}\right)\left(e^{\beta} - e^{-\beta}\right)} &= \frac{e^{\beta} - e^{-\beta}}{e^{\beta} + e^{-\beta}} = \tanh\beta \end{aligned} \tag{2}$$

Finalmente, sustituyendo en la imanación (1) queda:

$$M = n\mu_B B \tanh \frac{\mu_B B}{k_B T}$$

como queríamos demostrar.

Problema 4.2

El hamiltoniano de espín para la molécula de H_2 es

$$\mathcal{H}_s = a + \frac{b}{\hbar^2}\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2,$$

donde $\vec{s}_i$ denota el operador de espín del electrón i-ésimo. Demostrar que este hamiltoniano se escribe, de forma equivalente, como

$$\mathcal{H}_s = 2E_0 + \frac{Q-I}{1-S_{ab}^2} + \left(1 - \frac{S(S+1)}{2}\right)\mathcal{J},$$

donde $S = 0$ (1) para el estado singlete (triplete), S_{ab}, Q e I son las integrales de solapamiento, de Coulomb y de intercambio, respectivamente, E_0 es la energía de un átomo de hidrógeno aislado y $\mathcal{J}$ es la constante de acoplamiento por intercambio

El espín total del conjunto de dos electrones es, por definición,

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2,$$

de manera que

$$\vec{S}^2 = \vec{s}_1^2 + \vec{s}_2^2 + 2\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2,$$

o bien, teniendo en cuenta que $\vec{S}$, $\vec{s}_1$ y $\vec{s}_2$ denotan operadores,

$$S(S+1)\hbar^2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2,$$

de donde

$$\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{1}{2}\left(S(S+1) - \frac{3}{2}\right)\hbar^2 \tag{3}$$

Sustituyendo (3) en la definición del hamiltoniano, tenemos entonces

$$\mathcal{H}_s = a + \frac{b}{2}\left(S(S+1) - \frac{3}{2}\right), \tag{4}$$

donde $S = 0$ para el estado singlete, y $S = 1$ para el triplete. Entonces

$$\begin{aligned} \varepsilon_t &\equiv 2\varepsilon_0 + \frac{Q-I}{1-S_{ab}^2} = a + \frac{b}{4} \\ \varepsilon_s &\equiv 2\varepsilon_0 + \frac{Q+I}{1+S_{ab}^2} = a - \frac{3b}{4} \end{aligned} \tag{5}$$

El sistema (5) se puede invertir para expresar a y b en función de las energías de los estados singlete y triplete. El resultado es

$$a = \varepsilon_t + \frac{\mathcal{J}}{4}$$

y

$$b = -\mathcal{J}$$

que, sustituidas en (4) y simplificando, llevan a

$$\mathcal{H}_s = 2E_0 + \frac{Q-I}{1-S_{ab}^2} + \left(1 - \frac{S(S+1)}{2}\right)\mathcal{J},$$

como queríamos demostrar.

Problema 4.3

> Deducir la relación de dispersión para magnones de una red cúbica simple formada por átomos de espín S.

Supongamos, por simplicidad, que no existe campo magnético aplicado. En tal caso, la relación de dispersión para ondas de espín es

$$\epsilon(\vec{k}) = 2S\sum_j \mathcal{J}_j \operatorname{sen}^2\frac{\vec{k}\cdot\vec{r}_j}{2},$$

donde $\mathcal{J}_j$ es el parámetro de intercambio para la partícula j-ésima, $\vec{r}_j$ es su vector de posición y la suma se extiende a todas las partículas. Arbitrariamente hemos hecho $\epsilon_0 = 0$. Para átomos dispuestos según una red cúbica simple, los vectores de posición son de la forma

$$\vec{r}_j = a(n,m,p),$$

donde a es el parámetro reticular de la red y n, m y p son números enteros. Entonces:

$$\epsilon(\vec{k}) = 2S\sum_{n,m,p} \mathcal{J}_{nmp} \operatorname{sen}^2\left(\frac{nk_xa + mk_ya + pk_za}{2}\right) \tag{6}$$

En la práctica, la suma que aparece en (6) se suele simplificar aceptando la *aproximación de primeros vecinos*. Bajo esta aproximación, las constantes $\{\mathcal{J}_j\}$ solo toman valores significativos entre primeros vecinos. En nuestro caso, los primeros vecinos de un átomo arbitrariamente situado en el origen son los localizados en

$$(a,0,0), (-a,0,0), (0,a,0), (0,-a,0), (0,0,a), (0,0,-a),$$

de modo que (6) se reduce a

$$\begin{aligned}\epsilon(\vec{k}) = 2S\mathcal{J}\Bigg[&\operatorname{sen}^2\left(\frac{k_xa}{2}\right) + \operatorname{sen}^2\left(-\frac{k_xa}{2}\right) + \operatorname{sen}^2\left(\frac{k_ya}{2}\right) + \\ &+ \operatorname{sen}^2\left(-\frac{k_ya}{2}\right) + \operatorname{sen}^2\left(\frac{k_za}{2}\right) + \operatorname{sen}^2\left(-\frac{k_za}{2}\right)\Bigg] = \\ = 4S\mathcal{J}\Bigg[&\operatorname{sen}^2\left(\frac{k_xa}{2}\right) + \operatorname{sen}^2\left(\frac{k_ya}{2}\right) + \operatorname{sen}^2\left(\frac{k_za}{2}\right)\Bigg],\end{aligned}$$

que es la relación de dispersión para magnones en este sólido.

Problema 4.4

> Utilizando la teoría de ondas de espín en el límite $\vec{k} \to \vec{0}$, demostrar que el número de magnones en una red bidimensional es arbitrariamente grande.

El número de magnones de una red bidimensional que están excitados a una temperatura T, que está dado por

$$N(T) = \int_0^\infty n(\epsilon,T)D(\epsilon)d\epsilon = \int_0^\infty \frac{D(\epsilon)}{e^{\epsilon/k_BT} - 1}, \tag{7}$$

donde $n(\epsilon,T)$ es la distribución de Planck y $D(\epsilon)$ es la densidad de estados para los magnones.

Por otra parte, la relación de dispersión para ondas de espín en el límite $\vec{k} \to \vec{0}$ es

$$\epsilon(\vec{k}) \approx \frac{S}{2} \sum_j \mathcal{J}_j (\vec{k} \cdot \vec{r}_j)^2,$$

donde la suma se extiende a los primeros vecinos. Las componentes de los vectores $\vec{k}$ permitidos por las condiciones de contorno son de la forma

$$k_i = \frac{2\pi}{L_i} p,$$

donde L_i es la longitud del sólido en la dirección i y p es un número entero. En este caso, la densidad de estados en el espacio recíproco es, como sabemos,

$$D_2(\vec{k}) = \frac{S}{4\pi^2}$$

En la red bidimensional del problema, que supondremos rectangular en general, los primeros vecinos de un átomo dado se encuentran en las posiciones

$$(a, 0), (-a, 0), (0, b), (0, -b),$$

de modo que

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{S}{2} \left[\mathcal{J}_1 (k_x a)^2 + \mathcal{J}_1 (k_x a)^2 + \mathcal{J}_2 (k_y b)^2 + \mathcal{J}_2 (k_y b)^2 \right],$$

donde $\mathcal{J}_1$ y $\mathcal{J}_2$ son las constantes de acoplamiento de los átomos situados en $(\pm a, 0)$ y $(0, \pm b)$, respectivamente. Bajo esta aproximación, la relación de dispersión es, en definitiva,

$$\epsilon(\vec{k}) = S \left(\mathcal{J}_1 a^2 k_x^2 + \mathcal{J}_2 b^2 k_y^2 \right) \tag{8}$$

Podemos escribir (8) en la forma equivalente

$$\frac{k_x^2}{\epsilon / \mathcal{J}_1 S a^2} + \frac{k_y^2}{\epsilon / \mathcal{J}_2 S b^2} = 1,$$

lo que indica que las líneas isoenergéticas en el espacio (en este caso, bidimensional) recíproco son elipses de semiejes

$$a^* = \frac{1}{a} \left(\frac{\epsilon}{\mathcal{J}_1 S} \right)^{1/2}$$

y

$$b^* = \frac{1}{b} \left(\frac{\epsilon}{\mathcal{J}_2 S} \right)^{1/2}$$

y áreas

$$A^* = \pi a^* b^* = \frac{\pi}{ab} \frac{1}{S\sqrt{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2}} \epsilon$$

Así pues, la densidad de estados en la escala de energía para magnones en la red bidimensional es

$$D(\epsilon) d\epsilon = \frac{A}{4\pi^2} dA^* = \left\| dA^* = \frac{\pi}{ab} \frac{1}{S\sqrt{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2}} d\epsilon \right\| = \frac{A}{4\pi} \frac{1}{ab} \frac{1}{S\sqrt{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2}} d\epsilon$$

El número de magnones excitados a la temperatura T es, entonces,

$$N(T) = \frac{A}{4\pi} \frac{1}{ab} \frac{1}{S\sqrt{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2}} \int_0^\infty \frac{1}{e^{\epsilon / k_B T} - 1} d\epsilon$$

que, introduciendo el cambio de variable

$$x = \frac{\epsilon}{k_B T},$$

se escribe también

$$N(T) = \frac{A}{4\pi} \frac{k_B T}{ab} \frac{1}{S\sqrt{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2}} \int_0^\infty \frac{1}{e^x - 1} dx \tag{9}$$

La integral que aparece en (9) está tabulada [*cf.* ec. (**??**)]:

$$\int_0^\infty \frac{1}{e^x - 1} dx = \Gamma(1)\zeta(1) = \frac{1}{1} + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + ...,$$

de modo que (9) queda:

$$N(T) = \frac{A}{4\pi} \frac{k_B T}{ab} \frac{1}{S\sqrt{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p} \longrightarrow \infty \tag{10}$$

El resultado (10) indica que el número de magnones excitados a una cierta temperatura es arbitrariamente grande y que, por tanto, la imanación es arbitrariamente pequeña, lo que demuestra que esta red bidimensional no exhibe ferromagnetismo.