

## Magnetismus: neinterakujúce magnetky 2

V tejto jednotke študujeme magnetismus atómov s čiarovými a fázovými symetriami. Uvažujeme  $n$  elektrónov v šípke s  $(2l+1) \cdot 2$  stavmi.

počet možných stavov:  $\binom{2(2l+1)}{n}$  — ich energie nie sú rovnaké!

stav s najnižšou energiou je daný Hundovým pravidlami:

- 1) najvyšší stav má maximálny moment šípky  $S$
- 2) pre danú  $S$  sa energia minimalizuje pre maximálne  $L$
- 3) celkový moment hybnosti  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  je fixovaný spin-orbitálnou väzbou
 

$J = |L - S|$  pre  $n \leq 2l + 1$   
 $J = L + S$  pre  $n \geq 2l + 1$

Kvalitatívne zdôvodnenie:

energia coulombovského odpudzovania medzi elektrónmi je minimálna, ak elektróny sa vyhybajú jeden druhému. To je automaticky tam, kde majú rovnaký spin (Pauliho princíp).

Teda: Pauli + Coulomb  $\Rightarrow$  Hund

Príklad:  $l=2, n=3$ : 
 $\begin{matrix} 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & & \end{matrix}$ 
 = práve 3  $m$  a 2

$$S = \frac{3}{2}, L = 3, J = \frac{3}{2}$$

Tabuľka  $S, L, J$  pre  $l=2$ :

| $n$ | 1             | 2 | 3             | 4 | 5             | 6 | 7             | 8 | 9             |
|-----|---------------|---|---------------|---|---------------|---|---------------|---|---------------|
| $S$ | $\frac{1}{2}$ | 1 | $\frac{3}{2}$ | 2 | $\frac{5}{2}$ | 2 | $\frac{3}{2}$ | 1 | $\frac{1}{2}$ |
| $L$ | 2             | 3 | 3             | 2 | 0             | 2 | 3             | 3 | 2             |
| $J$ | $\frac{3}{2}$ | 2 | $\frac{3}{2}$ | 0 | $\frac{5}{2}$ | 4 | $\frac{9}{2}$ | 4 | $\frac{5}{2}$ |

Pre danú  $J$  môže prímes  $J_z$  nadobúdať  $2J+1$  hodnôt:

$$J_z |Jm\rangle = m |Jm\rangle \quad \text{kde } m = -J, -J+1, \dots, 0, \dots, J-1, J$$

$2J+1$  stavov  $|Jm\rangle$  má v nulovom vonkajšom poli h' i'm' energie.

### • Magnetický hamiltonián

$$\text{videli sme, že } H' = \underbrace{\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_i (\mathbf{B} \times \mathbf{r}_i)^2}_{\text{diamagnetické efekty}} + \underbrace{\mu_B \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})}_{\text{Zeemanov efekt}} + \underbrace{\lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}_{\text{spin-orbit coupling}}$$

→ táto je  
diamagnetické efekty  
→ táto je

Zeemanov efekt  
v 3. Hundovom  
pravidle

$$\Rightarrow \text{magnet. hamiltonián } H' = \mu_B \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$$

Uvažujme pole v smere  $z$ .

Uvažujeme, že (ak sa obmedzíme na stavy  $|Jm\rangle$ ) potom

$$\begin{aligned} (1) \quad H' &= g \mu_B B J_z \\ (2) \quad g &= \frac{3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \end{aligned} \rightarrow \text{atomový } g\text{-faktor}$$

Dôkaz.

Podľa Wigner-Eckartovej vety sú v báze  $|Jm\rangle$  maticové elementy všetkých vektorových operátorov navzájom úmerné.

$$\text{Preto } \langle Jm | \mathbf{L} + 2\mathbf{S} | Jm' \rangle = g \langle Jm | \mathbf{J} | Jm' \rangle \quad (3)$$

kde  $g$  je nejaká konštanta. Odhliadnime (1).

Našou úlohou (3) skontrolujeme vektormi  $\langle Jm' | \mathbf{J} | Jm \rangle$  a vyčítame celú:

$$\sum_{m'} \langle Jm | \mathbf{L} + 2\mathbf{S} | Jm' \rangle \cdot \langle Jm' | \mathbf{J} | Jm \rangle = g \sum_{m'} \langle Jm | \mathbf{J} | Jm' \rangle \cdot \langle Jm' | \mathbf{J} | Jm \rangle$$

keďže systém stavov  $|Jm\rangle$  je úplný, potom

$$\sum_{m'} |Jm'\rangle \langle Jm'| = 1$$

a preto  $\langle Jm | (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{J} | Jm \rangle = g \langle Jm | \vec{J}^2 | Jm \rangle$  (4)

Plati však  $\langle Jm | \vec{J}^2 | Jm \rangle = J(J+1)$  (5)

Naviac  $\vec{S}^2 = (\vec{J} - \vec{L})^2 = \vec{J}^2 + \vec{L}^2 - 2\vec{L} \cdot \vec{J} \rightarrow \vec{L} \cdot \vec{J} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 + \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$   
 $\vec{L}^2 = (\vec{J} - \vec{S})^2 = \vec{J}^2 + \vec{S}^2 - 2\vec{J} \cdot \vec{S} \rightarrow 2\vec{S} \cdot \vec{J} = \vec{J}^2 + \vec{S}^2 - \vec{L}^2$

Dalej platí  $\langle Jm | \vec{L}^2 | Jm \rangle = L(L+1)$

$$\langle Jm | \vec{S}^2 | Jm \rangle = S(S+1)$$

Preto  $\langle Jm | (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{J} | Jm \rangle = \frac{1}{2} [3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]$  (6)

Doradením (5,6) do (4) dostávame (2).

• Volná energia atómu v poli

$$F(T, B) = -T \ln \sum_{m=-J}^J e^{-\frac{g \mu_B B m}{T}}$$

Pri vysokých teplotách dostávame

$$F(T, B) \approx -T \ln \left[ (2J+1) + \frac{g^2 \mu_B^2 B^2}{T^2} \sum_{m=1}^J m^2 + \dots \right]$$

$$\sum_{m=1}^J m^2 = \frac{1}{6} J(J+1)(2J+1)$$

$$F(T, B) \approx -T \ln (2J+1) - \frac{g^2 \mu_B^2 B^2 J(J+1)}{6T}$$

magnetický moment  $\mu = -\frac{\partial F}{\partial B} = \frac{g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3T} B$

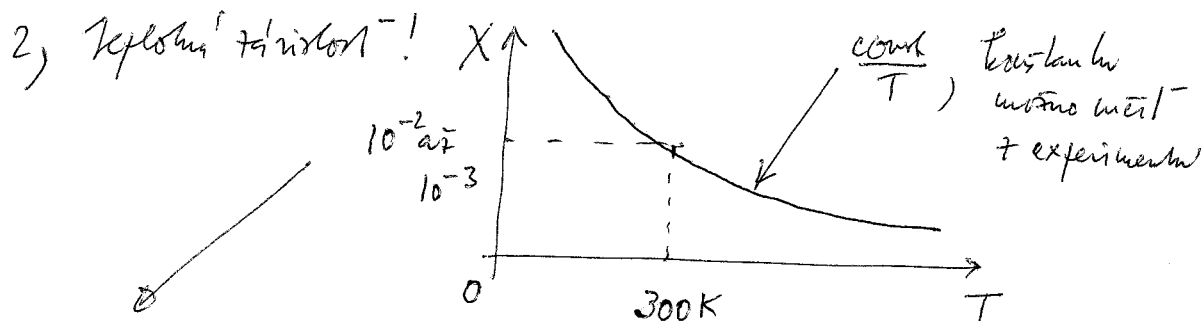
susceptibilita:  $\chi = \left( \frac{n_0 n}{3} \left( \frac{\mu_B^2 p^2}{T} \right) \right)$

kde  $p = g \sqrt{J(J+1)}$   
 = veľkosť momentu atómu

$\mu_B$  je jednotka

$$\boxed{\chi = \left( \frac{\mu_0 m}{3} \right) \left( \frac{\mu_B^2 p^2}{T} \right)} \quad \text{Curie}$$

Porušenie: 1,  $\chi > 0$  -- paramagnetizmus; natočenie vopred existujúceho magnetického preferenčným smerom



↖ možno merať  $p$

Experiment: lanthanoidy:  $p = g\sqrt{S(S+1)}$  v zhode s Hundovým pravidlom (pretože magnetické momenty sú veľké v porovnaní s smieškovými konštantami)

prechodové prvky (Fe, Co, Ni):  $p = 2\sqrt{S(S+1)}$  ⇒ možno interpretovať tak, že  $\vec{L} = 0$  (zanúšťanie orbitálneho momentu) (zanúšťanie je dôsledkom toho, že rotácia magnetického momentu je porovnateľná s smieškovými konštantami)

Príklad 3: paramagnetická susceptibilita je rádovo väčšia než diamagnetická

rádový odhad:  $n \sim \frac{1}{a^3}$  (maximálna koncentrácia magn. iónov)

$$\chi \sim \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 \epsilon_0 c^2 T a^3} \sim \frac{\frac{e^2}{\epsilon_0 a} \cdot \frac{\hbar^2}{m a^2}}{m c^2 \cdot T} \sim \frac{10 \text{ eV} \cdot 10 \text{ eV}}{10^6 \text{ eV} \cdot 10^{-2} \text{ eV}} \sim 10^{-2}$$

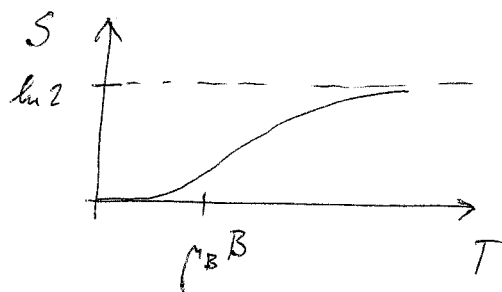
(pri izbovej teplote)

## Chladienie adiabatichnou demagnetizáciou paramagnetických solí

príklad (usj jednoducho):  $S = \frac{1}{2}$ ,  $L = 0$

voľná energia  $F = -T \ln \left( 2 \cosh \left( \frac{\mu_B B}{T} \right) \right)$

entropia  $S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \ln \left( 2 \cosh \left( \frac{\mu_B B}{T} \right) \right) - \left( \frac{\mu_B B}{T} \right) \tanh \left( \frac{\mu_B B}{T} \right)$



$$T \rightarrow \infty: S \rightarrow \ln 2$$

$$T \rightarrow 0: S \approx \frac{2\mu_B B}{T} e^{-\frac{2\mu_B B}{T}}$$

entropia je iba funkciou  $\frac{\mu_B B}{T}$  !

### Proces chladienia:

1. izotermicky zvýšime pole  $B_1$  pri počiatočnej teplote  $T_1$
2. adiabaticky znížime pole na hodnotu  $B_2$  (t.j. teplo vymenené so okolím  $dQ = 0$ )

entropia je konštantná:  $S\left(\frac{\mu_B B_1}{T_1}\right) = S\left(\frac{\mu_B B_2}{T_2}\right)$

Preto  $\boxed{T_2 = T_1 \cdot \frac{B_2}{B_1}} \Rightarrow T_2 \ll T_1$

Pozorovania: 1. metóda funguje, ak entropia systému je dominovaná entropiou spinov  $\rightarrow$  pri nížších teplotách,  $T_1 \sim 1\text{ K}$

2. pole  $B_2$  nie je nula ani pri nízkej vonk. polo, lebo magnetky navzájom interagujú  $\Rightarrow$  treba použiť materiály s malými  $B_2$ ; možno dosiahnuť  $T_2 \sim 10^{-3}\text{ K}$  !

3. metóda funguje aj keď použijeme na miesto elektrónových spinov jadrové spinu (keďže  $B_2$  môže byť veľmi malá). Typické parametre:  $T_1 = 10^{-2}\text{ K}$ ,  $B_1 = 5\text{ T}$   
 $\rightarrow \boxed{T_2 \sim 10^{-6}\text{ K}}$  !!