

## Trabajo práctico N° 4

Ejemplos Prácticos - Magnetismo - 12/04/19

Comenzaremos ahora a estudiar ejemplos prácticos en los que el operador densidad  $\hat{D}$  (o a su equivalente clásico, la densidad de probabilidad  $D_N$ ) describe macroestados caracterizados por ser los más simples posibles: los llamamos *estados de equilibrio*. Como vimos ya en una práctica anterior, estos macroestados no evolucionan con el tiempo. Se caracterizan por maximizar el desorden (i.e.,  $S(\hat{D})$  es máxima, sobre el conjunto de los  $\hat{D}$  posibles) para las condiciones fijadas. O, de otra manera, contienen el mínimo de información provisto por esas condiciones.

En el *Ensemble Microcanónico* el número  $N$  de partículas de un sistema se encuentra exactamente definido, mientras que la energía  $E$  lo está a menos de un ancho  $\delta$ , con  $\delta \ll E$  (es decir, el sistema está térmicamente aislado). Como consecuencia de ello,

$$\hat{D} \equiv \frac{\hat{I}}{W(E)},$$

en donde  $W(E)$  es la dimensión del subespacio asociado a esas energías. Por el lado clásico, la distribución de probabilidad de equilibrio  $D_N(q^{3N}, p^{3N})$  es uniforme dentro de la región relevante del espacio de fases. Los promedios sobre el ensamble de un observable  $f(\mathbf{q}^{3N}, \mathbf{p}^{3N})$  se escriben:

$$\langle f \rangle \equiv \frac{1}{W} \int f(\mathbf{q}^{3N}, \mathbf{p}^{3N}) d\tau_N,$$

donde  $W$  es el “volumen” total de la región accesible del espacio de fases. En la práctica anterior calculamos la entropía para este caso particular de probabilidades uniformes. Esta se interpreta ahora como la *entropía de equilibrio* del sistema, con lo que la conexión con la termodinámica es inmediata.

Cuando un sistema puede intercambiar energía (calor) con un termostato en lugar de estar perfectamente aislado, la energía está *solamente definida en promedio* ( $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$ ). El macroestado de equilibrio estará definido por el operador de *Boltzmann-Gibbs*:

$$\hat{D} = \frac{\exp[-\beta \hat{\mathcal{H}}]}{\mathcal{Z}_C},$$

en donde  $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$ . La *función de partición*  $\mathcal{Z}_C(\beta, N)$  queda determinada por la normalización de  $\hat{D}$ :

$$\mathcal{Z}_C \equiv \text{Tr}(\exp[-\beta \hat{\mathcal{H}}]), \quad (4.1)$$

Para los casos de grados de libertad clásicos, la *distribución canónica* de probabilidad de Boltzmann-Gibbs es

$$D_N(q^{3N}, p^{3N}) = \frac{\exp[-\beta \mathcal{H}(q^{3N}, p^{3N})]}{\mathcal{Z}_C},$$

con

$$\mathcal{Z}_C \equiv \int d\tau_N \exp[-\beta \mathcal{H}(q^{3N}, p^{3N})].$$

En el caso canónico el contacto con la termodinámica no parece tan inmediato, pero puede hacerse con relativa facilidad a través de la función de partición  $\mathcal{Z}_C$ .

**Constantes:**  $\mu_B = e\hbar/2m = 9,27 \times 10^{-24} J/Tesla$  ;  $k_B = 1,38 \times 10^{-23} J/K$

**Problema 1.** Considerando el ensamble canónico:

a) Demuestre las siguientes identidades:

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = -\frac{\partial \log Z_C}{\partial \beta}$$

$$F = -\frac{1}{\beta} \log Z_C,$$

en donde la función  $F(T, N)$  es definida por  $F(T, N) \equiv \langle H \rangle - TS$  (llamada *energía libre de Helmholtz*).

b) En los sistemas magnéticos, la energía de acoplamiento entre el sistema y el campo de inducción magnética  $\mathbf{B}$  puede escribirse  $\hat{H}_{mag} = -\hat{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{B}$ , donde  $\hat{\mathbf{M}} = \sum_i \hat{\mu}_i$  es el operador que corresponde a la magnetización del sistema. Muestre que

$$\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = k_B T \frac{\partial \log Z_C}{\partial \mathbf{B}}$$

El límite  $N \rightarrow \infty$  es llamado *límite termodinámico* (¿por qué?). Como veremos en prácticas siguientes y se ha mostrado en la teoría, en esas condiciones los macroestados de equilibrio definidos para los distintos ensambles deberían dar los mismos resultados.

El ejemplo que sigue se ha visto en forma detallada en la teoría, por lo que nos detenemos únicamente en aquellos puntos que queremos acentuar.

**Problema 2.** [*Sistema de Dos Niveles.*] Cada una de las  $N$  entidades o partículas que conforman un sistema tiene solamente dos niveles de energía ( $e_a$  y  $e_b = e_a + \Delta\epsilon$ , con  $\Delta\epsilon > 0$ ).

- ¿Cuál es la mínima y la máxima energía total  $U$  del sistema? ¿Cuántos microestados hay asociados a esas energías? ¿Para qué valor de la energía espera que haya un número máximo de microestados?
- Grafique a mano alzada un esquema del número de microestados  $W(U)$ . Señalar los valores de  $U$  para los cuales la temperatura absoluta del sistema es negativa. Si se pusiera en contacto térmico a dos de estos sistemas (manteniendo el conjunto aislado): uno con  $T = T_o > 0$  y otro idéntico pero con  $T = -|T_o| < 0$ , ¿en qué dirección fluiría el calor?
- Operador  $\hat{D}$  y probabilidades.* Calcular la probabilidad  $p_a = P(e_a)$  de encontrar a una partícula en su estado fundamental o  $p_b = P(e_b)$  en el estado excitado en función de la temperatura ¿Hay correlación entre las partículas?
- ¿Qué temperaturas deben alcanzarse para que  $p_a$  sea apreciablemente distinta de cero? Graficar en forma esquemática –teniendo en cuenta la dependencia de las probabilidades  $p_a$  y  $p_b$  con la temperatura– las curvas  $\langle \hat{\mathcal{H}}(T)/N \rangle$  y  $S(T)/N$ .
- Usando la energía, calcular el calor específico, su dependencia funcional a bajas y altas temperaturas, y la temperatura de su máximo. La Figura 1 nos muestra el calor específico de cierto material magnético. Estime el valor del *gap*  $\Delta\epsilon$  en este caso particular.

**Paramagneto de Brillouin.** En la teoría han estudiado un sistema paramagnético de spin  $1/2$  en los ensambles microcanónico y canónico. Ahora generalizaremos ese estudio al caso de un “spin”  $J$  arbitrario, dentro del ensamble canónico.

**Problema 3.** Muchas veces, a temperaturas suficientemente elevadas, el magnetismo de un material *aislador* en el que existe un tipo iones con momento magnético distinto de cero puede ser entendido cuantitativamente por un modelo simple. Consideraremos al sólido como un conjunto de  $N$  momentos magnéticos iguales, cada uno con proyección  $z$  de momento magnético igual a  $\mu_i^z = -g\mu_B J_i^z$ , para  $i = 1, \dots, N$ . La máxima proyección de momento magnético en el eje  $z$  es entonces  $\mu = g\mu_B J$ .  $g$  es llamado *factor de Landé*; dentro de esta práctica pensaremos que es simplemente una constante, cercana a 2.

Se puede considerar que los momentos se encuentran arreglados en una red con cierta geometría (por ejemplo una red cúbica o triangular). El único tipo de energía que posee el sistema es energía potencial magnética. Resulta entonces que  $\hat{H} = -\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}$ . Consideraremos que la inducción magnética  $\mathbf{B}$  apunta en la dirección del eje de coordenadas  $z$ .

- ¿Por qué llamamos a esto simplemente *un modelo*? ¿Por qué es importante la condición de *aislador*? Dada la definición de  $\hat{D}$  en equilibrio en el conjunto canónico, ¿qué base del espacio de Hilbert de  $N$  partículas será razonable elegir para tomar las trazas?
- Calcule la función de partición del sistema  $\mathcal{Z}_C(\beta, B)$ , suponiendo que un termostato lo mantiene a temperatura  $T$ . Para ello *muestre* que por ser un sistema de entidades independientes  $\mathcal{Z}_C = \mathcal{Z}_1^N$ . Luego calcule  $\mathcal{Z}_1(\beta, B)$  (note que esto implica simplemente evaluar una serie geométrica).
- Calcule la energía interna media del sistema. Muestre que la magnetización en la dirección del eje  $z$  puede escribirse como  $\langle M \rangle = N\mu B_J(x)$ , en donde

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \cotgh\left[\frac{2J+1}{2J}x\right] - \frac{1}{2J} \cotgh\left[\frac{1}{2J}x\right],$$

y  $x = \mu B/kT$ .

- Mostrar que la magnetización es una función lineal de  $B$  para campos chicos y temperaturas grandes. Esto es equivalente a encontrar la *ley de Curie*:

$$\chi \equiv \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \Big|_{B=0} = \frac{Np^2\mu_B^2}{3k_B T}, \quad (4.2)$$

en donde  $p^2 = g^2 J(J+1)$ . Notar que ahora sabemos como escribir la constante  $C$  de esta ley (que en el contexto de la termodinámica es fenomenológica) en términos de las constantes que definen el problema.

- Mostrar que la magnetización satura para campos grandes y temperaturas chicas. En base a este punto y al anterior, realizar un esquema de  $\langle M \rangle$  como función de  $B$  para distintas temperaturas.

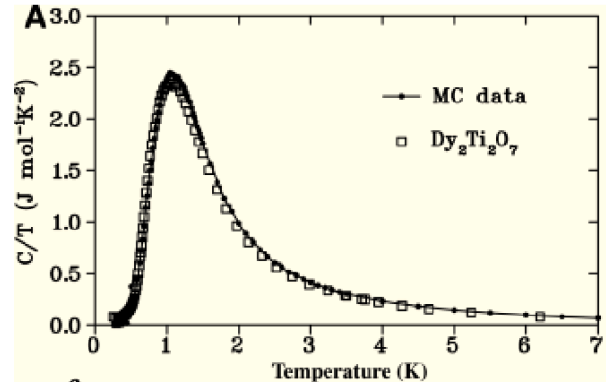


Figura 1: Medida experimental de Calor Específico sobre la temperatura (símbolos abiertos) y simulación numérica (símbolos cerrados y línea continua) para el  $Dy_2Ti_2O_7$  (S. T. Bramwell y M. Gingras, Science **294** 1495 (2001))

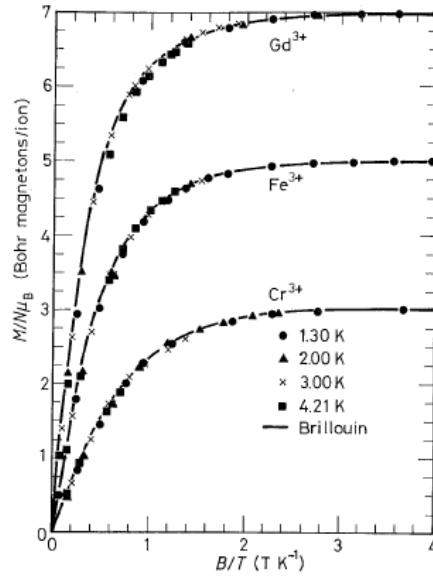


Figura 2: Curvas de magnetización para distintos iones en función de distintos campos y temperaturas. Las curvas continuas son soluciones de Brillouin (Libro J.R. Hook, H.E.Hall, *Solid State Physics* pag. 200).

**Problema 4.** La figura 2 muestra los resultados de la magnetización normalizada por  $N\mu_B$  (adimensional) en función de la inducción magnética sobre temperatura (en Tesla/K). Las curvas continuas son distintas soluciones de Brillouin

- A partir del valor de saturación de la magnetización, encuentre el valor del momento magnético  $\mu$  para cada sustancia.
- La saturación se observa cuando  $x \gg 1$  con  $x = \mu B/kT$ . Sin embargo, experimentalmente ni el campo ni la temperatura son variables totalmente libres. De manera realista, el campo máximo podría ser  $B = 1$  Tesla. ¿Cómo se traduce en temperaturas la condición de saturación?

**Problema 5.** Los archivos “DatosOxido.dat” y “DatosAlumbre.dat” contienen la susceptibilidad (en unidades de  $\mu_B$  por ion paramagnético por Tesla) en función de la temperatura (en K) para el  $Gd_2O_3$  y el  $CrK(SO_4)_2 \cdot 12H_2O$ .

- Encontrar el valor de  $p$  para los iones de Gd y Cr en estos compuestos.
- Basados en el valor de  $p$  del punto anterior estimar la magnitud de los campos necesarios para saturar a cada uno de estos compuestos a 300 K y a 4 K.

**Problema 6. Paramagnetismo de Langevin.** Si suponemos momentos magnéticos clásicos, la energía del sistema puede ahora expresarse como  $\mathcal{H} = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{M} = -B\mu \sum_i \cos(\theta_i)$ . Siguiendo a Langevin, la función de partición debe calcularse ahora integrando sobre orientaciones continuas (es decir, sobre el ángulo polar  $(\theta_i)$  y acimutal  $\phi_i$ ) de cada  $\vec{\mu}_i$  en lugar de sumar sobre las componentes discretas  $J_i^z$ :

$$\mathcal{Z}_c = \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^\pi d\theta_1 \sin(\theta_1) \dots \int_0^{2\pi} d\phi_N \int_0^\pi d\theta_N \sin(\theta_N) \exp[-\beta\mathcal{H}(\theta_1, \dots, \theta_N)]. \quad (4.3)$$

Calcular esa función de partición. Mostrar que la magnetización promedio puede escribirse como  $\langle M \rangle = N\mu\mathcal{L}(x)$ , en donde  $\mathcal{L}(x)$  es llamada la *función de Langevin*. Mostrar que la ley de Curie sigue valiendo, y que  $\mathcal{B}_J(x) \rightarrow \mathcal{L}(x)$  cuando  $J$  crece (y  $g$  decrece, de modo que  $gJ$  y  $\mu$  permanezcan constantes).

**\*Problema 7.** [*Teorema de Bohr-Van Leeuwen (o ausencia de magnetismo en mecánica clásica)*]. Supongamos que las partículas (electrones y núcleos) que constituyen un material contenido en un volumen  $V$  fijo obedecen las leyes de la mecánica clásica. Muestre que la aplicación de un campo magnético arbitrario no tiene ninguna consecuencia observable sobre el sistema en equilibrio termodinámico. *Ayuda(s)*: Pensar cómo entra el potencial correspondiente al campo magnético (a diferencia del eléctrico) en el Hamiltoniano de un sistema clásico; y, ¿entre qué límites se realizan las integrales de la función de partición canónica clásica?

La consecuencia directa de este teorema es que la existencia de momentos magnéticos y con ello el paramagnetismo, e incluso el diamagnetismo, son fenómenos puramente cuánticos.