Задание по курсу "Магнетизм и магнитные наноматериалы"

15 мая 2022 г.

1. (*1 балл*) **Определения магнитного момента**

Согласно классическому определению Ампера магнитный момент частицы с зарядом e, обусловленный ее орбитальным движением есть $\boldsymbol{m} = (e/2c)\sum\limits_a \boldsymbol{r}_a \times \boldsymbol{v}_a$, где a - номер частицы. В рамках классической физики покажите, что это определение эквивалентно $\boldsymbol{m} = -dE/d\boldsymbol{H}$, где E - энергия частицы.

2. (*1 балл*) **Расщепление мультиплета.**

Найдите суммарное расщепление LS-мультиплета $E_{Jmax} - E_{Jmin}$, обусловленное спин-орбитальным взаидействием $\varepsilon_{so} = \lambda \boldsymbol{LS}$. Найдите расстояние между термами, соответствующими соседним значениям J: $E_{J+1} - E_J$.

3. (*4 балла*) **Магнитные ионы.**

3.1 (*1 балл*) Вычислить g_J для иона Ce, который имеет 1 электрон в $4f$-оболочке.

3.2 (*1 балл*) Определить терм, соответствующий основному состоянию иона Gd с незаполненной оболочкой $4f^7$.

3.3 (*1 балл*) Основное состояние свободного атома никеля дается в спектроскопических обозначениях символом $^3F_4$. Найти для этого состояния S, L, J и фактор Ланде. Рассчитать угловую скорость прецессии момента импульса в поле $H = 5 \cdot 10^3$ Э.

3.4 (*1 балл*)

Описать в спектроскопических обозначениях основное состояние иона железа Fe^{3+} и определить фактор Ланде. Определить магнитный момент иона Fe^{3+} в единицах магнетона Бора.

4. (*5 баллов*) **Диамагнитная восприимчивость.**

4.1 (*1 балл*) Оцените порядок величины ларморовской диамагнитной восприимчивости атома с небольшим числом электронов (молярной).

4.2 (*4 балла*)

Вычислить диамагнитную восприимчивость неона, воспользовавшись водородоподобными функциями с различными экранировочными постоянными (т.е. заменив в них $Z \to Z - \sigma_{(n,l)}$). Считайте $\sigma_{(1,0)} = 0.23$, $\sigma_{(2,0)} = 3.26$, $\sigma_{(2,1)} = 4.11$. Сравнить с экспериментальным значением $-6.7 \cdot 10^{-6} cm^3/mol$.

5. (*4 балла*) **Парамагнетизм Ланжевена.**

5.1 (*1 балл*) Рассмотрите ион с полным числом электронов Z и с частично заполненной оболочкой, имеющей момент J. Найдите отношение парамагнитной воспримчивости, определяемой законом Кюри, и ларморовской диамагнитной восприимчивости χ_{para}/χ_{dia} и получите численную оценку этого отношения.

5.2 (*1 балл*) Найдите терм основного состояния атома калия и вычислите для него теоретическое значение парамагнитной восприимчивости по формуле Хунда (в расчете на моль вещества) для произвольной температуры. Сравните с экспериментальным значением $(0.38/T)cm^3/mol$.

5.3 (*2 балла*) Некоторый идеальный газ при нормальных условиях состоит из атомов, основное состояние которых в спектроскопических обозначениях $^2D_{3/2}$. Вычислить намагниченность насыщения газа M_s и определить величину напряженности магнитного поля, необходимую для достижения намагниченности $M = M_s/2$.

6. (*6 баллов*) Замораживание орбитального момента.

Общая теория кристаллического поля, т.е. электрического поля, действующего со стороны окружающих ионов на данный ион, является достаточно сложной. Ионы, действующие на данный ион, называются лигандами. Если рассматриваемый ион является одним из ионов решетки ромбической симметрии (элементарная ячейка - прямоугольный параллелепипед с неравными сторонами), то

$$V_{cr} = Ax^2 + By^2 + Cz^2, \tag{1}$$

причем $C = -(A + B)$.

Рассмотрим атом с одним $2p$-электроном (спин не учитываем). Уровень энергии, на котором находится данный электрон, трехкратно вырожден. Его волновые функции $\Phi_{-1,0,1}$ отвечают разным проекциям орбитального момента на ось квантования. **Выпишите их.** Можно ввести действительные линейные комбинации этих волновых функций:

$$\Psi_x = \frac{\Phi_{+1} + \Phi_{-1}}{\sqrt{2}}, \quad \Psi_y = -i\frac{\Phi_{+1} - \Phi_{-1}}{\sqrt{2}}, \quad \Psi_z = \Phi_0. \tag{2}$$

Покажите, что эти волновые функции можно записать в виде

$$\Psi_x = xf(r), \quad \Psi_y = yf(r), \quad \Psi_z = zf(r), \tag{3}$$

где $f(r)$ радиальная часть волновой функции, не зависящая от сферических углов θ и φ.

Рассмотрите кристаллическое поле (1) как возмущение к гамильтониану данного электрона. **Покажите**, что волновые функции (3) являются правильными функциями нулевого приближения. **Найдите** расщепление невозмущенного уровня энергии данного электрона E_0 за счет кристаллического поля в первом порядке теории возмущений (получите выражение через константы A и B).

Покажите, что кристаллическое поле замораживает орбитальный магнитный момент, т.е. покажите, что среднее по состоянию значение проекции орбитального магнитного момента на эту ось равно нулю для любого из трех теперь невырожденных состояний (вырождение снимается кристаллическим полем). Оператор проекции орбитального магнитного момента на ось z имеет вид $\hat{\mu}_{L,z} = -i\mu_B(x\partial/\partial y - y\partial/\partial_x)$.

Аналогично можно доказать, что орбитальный момент замораживается и для $3d$-электрона, но в задаче этого не требуется.

7. (*5 баллов*) Температурная поправка к восприимчивости Паули.

(*4 балла*) Покажите, что если температура мала по сравнению с T_F, то зависящая от температуры поправка к восприимчивости Паули дается выражением

$$\chi(T) = \chi(0)\left(1 - \frac{\pi^2}{6}(kT)^2\left[\left(\frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)}\right)^2 - \frac{g''(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)}\right]\right). \tag{4}$$

(*1 балл*) Покажите, что для свободных электронов эте формула принимает вид

$$\chi(T) = \chi(0)\left(1 - \frac{\pi^2}{12}\left[\frac{kT}{\varepsilon_F}\right]^2\right). \tag{5}$$

При решении данной задачи вам потребуется техника взятия Зоммерфельдовских интегралов, с которой можно познакомиться в главе 2 книги [3] из списка литературы (она же книга [8] из конспекта лекций).

8. (*5 баллов*) Диамагнетизм Ландау: учет статистики Ферми.

В конспекте лекций проведен вывод диамагнитной восприимчивости Ландау для классической статистики Больцмана. Найдите диамагнитную восприимчивость в случае статистики Ферми. Для этого рассмотрите термодинамический потенциал вырожденного Ферми газа (познакомиться с выводом этой формулы можно, например, в пятом томе курса теоретической физики ЛЛ):

$$\Omega = -T\sum_{l=0}^{\infty}\ln\Big[1 + e^{-(\varepsilon_l - \mu)/kT}\Big]. \tag{6}$$

Рассмотрите случай $\mu_B B/kT \ll 1$. После подстановки в формулу для термодинамического потенциала энергии уровней Ландау полученную сумму по дискретному индексу можно вычислить с помощью формулы Эйлера-Маклорена:

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n + \frac{1}{2}) = \int_0^{\infty} f(x)dx + \frac{1}{24}f'(0),$$
$$f(x) = \ln[1 + Ae^{-\alpha x}], \quad \alpha = 2\mu_B B/kT, \quad A = e^{\frac{\mu - p_z^2/2m}{kT}}. \tag{7}$$

Далее $M = -d\Omega/dB$ и $\chi = dM/dH$.

9. (*4 балла*) Обменное расщепление для 3 электронов.

Определить обменное расщепление уровней энергии для 3 электронов. Оператор попарного обменного взаимодействия можно представить в виде:

$$\hat{V}_{ex} = -\sum J_{ij}(\frac{1}{2} + 2\hat{\boldsymbol{s}}_i\hat{\boldsymbol{s}}_j), \tag{8}$$

где суммирование ведется по всем парам электронов $\{12\}, \{13\}, \{23\}$. Оператор спина электрона есть $\hat{\boldsymbol{s}}_i = (1/2)\hat{\boldsymbol{\sigma}}$.

10. (*6 баллов*) **Спиральный магнитный порядок.**

Спиральный магнитный порядок часто возникает в редкоземельных металлах, которые имеют слоистую структуру. Эти материалы характеризуются ферромагнитным упорядочением внутри каждого слоя, но направления намагниченности двух соседних слоев составляют угол θ, см. рис. 1.

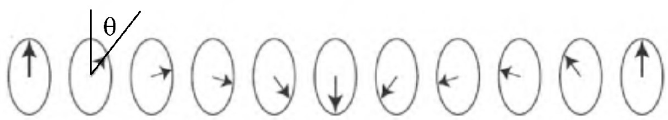

Рис. 1: Спиральный магнитный порядок. Внутри каждого слоя существует ферромагнитное упорядочение, приводящее к появлению однородной намагниченности. Векторы намагниченности соседних слоев составляют угол θ друг с другом.

Для описания спирального магнитного порядка рассмотрим модельный гамильтониан Гейзенберга, в котором учтено взаимодействие между ближайшими соседними слоями с обменным интегралом J_1 и следующими за ближайшими соседними слоями с обменным интегралом J_2. Каждый слой описывается спином S_i. В рамках классического рассмотрения соответствующая энергия имеет вид:

$$E = -\sum_{ij} J_{ij}\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_j = -2NS^2(J_1\cos\theta + J_2\cos 2\theta), \tag{9}$$

где N - число слоев, S- абсолютная величина спина слоя, который здесь рассматривается как классический вектор.

Очевидно, что при $J_1 > 0$ и $J_2 > 0$ в системе устанавливается межслойный ферромагнитный порядок. А вот если J_1 и J_2 - разного знака, то основное состояние системы не так очевидно, т.к. тенденция установить, скажем, ферромагнитное упорядочение между ближайшими слоями борется со стремлением системы выстроить следующих за ближайшими соседей антиферромагнитным образом. Это простейший пример фрустрированной системы.

Из соображений минимизации энергии системы построить фазовую диаграмму состояний системы в плоскости (J_1, J_2). Выделить области ферромагнитного, антиферромагнитного и спирального упорядочения. Написать уравнения границ этих областей.

11. (*1 балл*) **Восприимчивость антиферромагнетика.**

Рассмотрим антиферромагнетик, восприимчивость которого при $T = T_N$ $\chi(T_N) = \chi_0$. Предположим, что вкладом намагниченности собственной подрешетки в эффективное поле Вейсса можно пренебречь. Определить восприимчивость в перпендикулярном магнитном поле $\chi_\perp$ при двух различных температурах $T = 0$, $T = 2T_N$.

12. (*6 баллов*) **Критические индексы.**

Найти критические индексы γ, α и δ в теории Ландау для ферромагнетиков. За каждый по 2 балла. Обозначения см. в конспекте.

13. (*2 балла*) **Энергия основного состояния антиферромагнетика.**

Найдите энергию основного состояния цепочки из четырех спинов, описываемой антиферромагнитным гамильтонианом Гейзенберга со взаимодействием только между ближайшими соседями:

$$\hat{H} = J(\hat{S}_1\hat{S}_2 + \hat{S}_2\hat{S}_3 + \hat{S}_3\hat{S}_4 + \hat{S}_1\hat{S}_4), \tag{10}$$

где $J > 0$.

Указание. Представьте гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}J\Big[(\hat{S}_1 + \hat{S}_2 + \hat{S}_3 + \hat{S}_4)^2 - (\hat{S}_1 + \hat{S}_3)^2 - (\hat{S}_2 + \hat{S}_4)^2\Big]. \tag{11}$$

14. (*1 балл*) **Модель Гейзенберга для ферромагнетика.**

Покажите, что состояние $|0\rangle$, отвечающее максимальному значению проекции каждого спина на ось z является основным состоянием гамильтониана Гайзенберга (На лекции было показано, что это - собственное состояние).

Указание. Для доказательства сначала покажите, что $\langle \hat{S}_i\hat{S}_j\rangle \le S^2$.

15. (*6 баллов*) **Анизотропная модель Гейзенберга.**

Рассмотрите анизотропный гамильтониан Гейзенберга

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{ij}\Big[J_{z,ij}\hat{S}_{z,i}\hat{S}_{z,j} + J_{ij}(\hat{S}_{x,i}\hat{S}_{x,j} + \hat{S}_{y,i}\hat{S}_{y,j})\Big], \tag{12}$$

где $J_{z,ij} > J_{ij}$. Покажите, что основное состояние и состояние с одной спиновой волной, построенные на лекции, остаются собственными состояниями этого гамильтониана, но энергии возбуждения спиновых волн возрастают на некоторую величину (щель в спектре). Найдите ее. Покажите, что спонтанная намагниченность при низких температурах отличается от намагниченности насыщения на величину, экспоненциально зависящую от $-1/T$.

16. (*2 балла*) **Спин-флип переход.** Найдите, при каком значении константы одноостной анизотропии спин-флоп фаза исчезает и в антиферромагнетике при приложении параллельного намагниченности поля происходит только спин-флип переход.

17. (*8 баллов*) **Намагничивание одноостного ферромагнетика.**

Рассмотрите процесс намагничивания одноостного ферромагнетика типа легкая ось (легкая ось - ось z) с константой анизотропии K и пространственно однородной намагниченностью M. Полем размагничивания пренебречь.

17.1 (*2 балла*) Постройте зависимость проекции намагниченности на ось z от величины поля для случая, когда поле приложено вдоль z (т.е. H_z изменяется от больших отрицательных до больших положительных значений).

17.2 (*2 балла*) Постройте зависимость проекции намагниченности на ось, вдоль которой приложено поле, от величины поля для случая, когда поле приложено перпендикулярно z (т.е. $H_\perp$ изменяется от больших отрицательных до больших положительных значений).

17.3 (*4 балла*) Постройте зависимость проекции намагниченности на ось, вдоль которой приложено поле, от величины поля для случая, когда поле приложено под углом θ к оси z для нескольких (2-3) значений θ. Можно использовать любой софт.

18. (*3 балла*) Намагничивание однодоменной ферромагнитной частицы.

Пусть частица имеет форму эллипсоида вращения. Обозначим как N_0 размагничивающий фактор вдоль оси вращения эллипсоида, $N_\perp$ - в любом перпендикулярном направлении. Пусть эллипсоид вытянут вдоль оси вращения, тогда $N_0 < N_\perp$. Рассмотреть процесс намагничивания такой частицы в магнитном поле, параллельном оси эллипсоида. Построить зависимость проекции намагниченности на ось, вдоль которой приложено поле, от величины поля. Магнитокристаллической анизотропией пренебречь. Какую эффективную константу анизотропии дает фактор формы? Как следует подбирать форму частицы (вытягивать вдоль оси вращения или, наоборот, делать ее форму ближе к сферической), чтобы увеличить эффективную константу анизотропии и, соответственно, коэрцитивное поле?

19. (*7 баллов*) Профиль намагниченности доменной стенки.

Рассмотрите модель магнетика, в которой он списывается как сплошная среда. Намагниченность магнетика можно считать непрерывной функцией координаты $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = M\boldsymbol{m}(\boldsymbol{r})$, где $\boldsymbol{m}(\boldsymbol{r})$ - единичный вектор в направлении намагниченности, а ее модуль M считается постоянным. Энергия такого магнетика (без энергии анизотропии формы, которая здесь не рассматривается) может быть записана в виде:

$$E = \int d^3\boldsymbol{r}\Big[A\sum_i \Big(\boldsymbol{\nabla} m_i\Big)^2 - K(\boldsymbol{m}\boldsymbol{e}_z)^2\Big], \tag{13}$$

где первый член представляет собой энергию обменного взаимодействия (часть, зависящая от относительной ориентации намагниченности в близких точках), а второй член - энергию анизотропии легкой оси, которая направлена вдоль оси z. Найдите равновесный профиль намагниченности при заданных граничных условиях $\boldsymbol{m}(x = -\infty) = \boldsymbol{e}_z$, $\boldsymbol{m}(x = +\infty) = -\boldsymbol{e}_z$, т.е. найдите точный пространственный профиль доменной стенки. Вариационная производная энергии по намагниченности дает эффективное поле, действующее на намагниченность $\boldsymbol{H}_{eff} = -(1/M)\delta E/\delta \boldsymbol{m}$. В равновесии вращательный момент, действующий на намагниченность со стороны этого поля должен быть равен нулю $\boldsymbol{H}_{eff} \times \boldsymbol{m} = 0$. Из этого условия получите дифференциальное уравнение на $\boldsymbol{m}(x)$. Решив его с заданными граничными условиями, вы получите профиль стенки. Считать намагниченность функцией только координаты x (одномерная доменная стенка) и положить $\boldsymbol{m} = (0, \sin\theta(x), \cos\theta(x))$, т.е. рассмотреть блоховскую доменную стенку.

20. (*8 баллов*) **Энергия рассеянных полей.**

Определить энергию магнитного поля вблизи поверхности ферромагнетика, к которой выходят перпендикулярные к ней плоскопараллельные домены без изменения своей намагниченности. Дан размер домена a и значение намагниченности магнетика в каждом домене M.

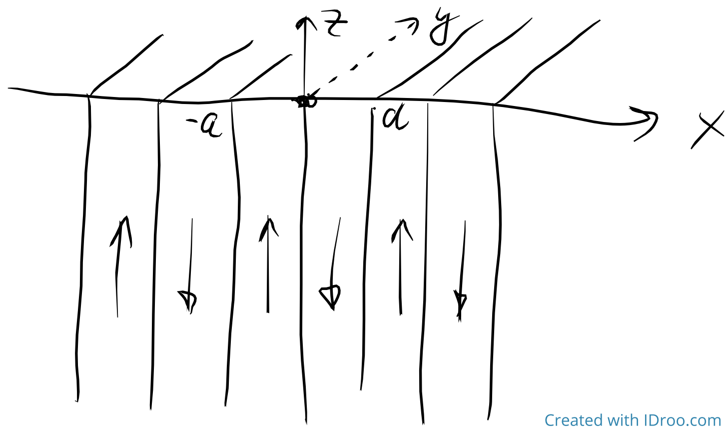

Рис. 2: К задаче 18.

Указание. Для этого сведите задачу к электростатической, введя "поверхностную плотность магнитного заряда связанную с разрывом намагниченности на поверхности ферромагнетика. Эта поверхностная плотность оказывается периодической функцией координаты x (см. рис. 1). Разложите ее в ряд Фурье. Запишите уравнение Лапласа для магнитостатического потенциала и решите его в верхнем и нижнем полупространствах путем преобразования Фурье. Сшейте решения на поверхности ферромагнетика $z = 0$. Найдите энергию поля как энергию взаимодействия магнитостатического заряда на заряженной поверхности.

21. (*4 балла*) **Динамика намагниченности во внешнем поле.**

Найдите точное решение системы (10.15) из конспекта при заданном начальном условии $\boldsymbol{M}(t = 0) = M_s(\sin\theta_0, 0, \cos\theta_0)$. Получите выражения для частоты прецессии и характерного времени поворота намагниченности к направлению поля.

22. (*2 балла*) **Внешняя восприимчивость ферромагнетика в условиях ФМР.**

Рассмотрите вынужденные слабым переменным полем колебания эллиптического ферромагнетика в постоянном магнитном поле, приложенном вдоль оси z, которая совпадает с одной из главных осей эллипсоида. Найдите восприимчивость ферромагнетика по отношению ко внешнему переменному полю, т.е. тензор $\hat{\chi}_e$, который определяется как $\delta\boldsymbol{M} = \hat{\chi}_e\boldsymbol{h}$. Учесть анизотропию формы. Магнитокристаллическую анизотропию не учитывать.

23. (*4 балла*) **ФМР для ферромагнетика типа легкая плоскость.**

Рассмотрите влияние магнитокристаллической анизотропии на ФМР в ферромагнетике типа легкая плоскость. Найти собственную частоту однородных колебаний. Рассмотреть крайние случаи приложения постоянного внешнего поля в легкой плоскости и перпендикулярно ей. Построить для этих случаев зависимости собственной частоты от постоянного внешнего поля.

24. (*4 балла*) **ФМР в ферримагнетиках с учетом затухания.**

Обобщите полученную на лекции формулу для восприимчивости χ_+ ферримагнетика на случай ненулевого затухания Гильберта. Учтите, что константы затухания в двух подрешетках различны $\alpha_A \neq \alpha_B$. Выпишите эффективную константу затухания. Найдите полуширину резонансной линии ΔH. При каком условии ширина резонансной линии резко растет?