

Magnetism

Magnetic moments,

1 spin (electron spin). ✓

2 orbital angular moment. ✓

3 nuclear spin x

↳ contribute น้อยกว่า electron spin ~ 2000 เท่า

First approximation : no interaction ระหว่าง magnetic moments.

ที่ \vec{B} (magnetic field) เป็นศูนย์

\Rightarrow เวกเตอร์เป็น random

ถ้า $\vec{B} \neq 0$

\Rightarrow magnetic field จะทำให้ magnetic moment

เรียงตัวไปในทิศทางเดียวกัน

จาก $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \Rightarrow \vec{\mu} \parallel \vec{B}$

หา magnetization : ค่าของ magnetic moments

ต่อหน่วยปริมาตร.



$\vec{M} \propto \vec{B}$ (pt approximation)

ที่ระดับอุณหภูมิ

$$\Rightarrow \vec{M} = \chi \vec{B}$$

magnetic susceptibility

$\Rightarrow \chi$ เป็นฟังก์ชันของ T .

จากค่าที่ χ มีค่า $+$ หรือ $-$ ทำให้เราสามารถ
 ประเภทของ magnetic response ได้ 2 แบบ.

1. $\chi < 0 \Rightarrow$ diamagnetism
 2. $\chi > 0 \Rightarrow$ paramagnetism
- } no interaction of μ

Diamagnetism

\hookrightarrow เกิดผลมาจาก electric current ของ e^- รอบ
 nucleus ที่ถูก induced จาก applied magnetic field

Larmor precession ω_L

$$I = -Ze \left(\frac{\omega_L}{2\pi} \right)$$

\uparrow
 เวลาที่ e^- เคลื่อนที่ครบ 1 รอบ.

โดยที่ $\omega_L = \frac{eB}{2mc}$

$$\Rightarrow I = -ze \cdot \frac{eB}{4\pi mc} = \frac{-ze^2}{4\pi mc} B$$

ลวดำ ลวดำ แข็งแข็ง

magnetic moment.

$$\mu = I(A)$$

enclosed area ของ current loop.



C.

$$\Rightarrow A = \pi \langle r^2 \rangle$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{-ze^2 B}{4\pi mc} \cdot \frac{\pi \langle r^2 \rangle}{c}$$

$$\mu = -\frac{ze^2}{4mc^2} \langle r^2 \rangle \cdot B.$$

ถ้ามี N atom / unit volume.

$$M = N\mu = \left(-\frac{Nze^2}{4mc^2} \langle r^2 \rangle \right) B \quad \chi$$

$$\Rightarrow \chi = -\frac{Nze^2}{4mc^2} \langle r^2 \rangle$$

สิ่งที่เราต้อง $\langle r^2 \rangle \leftarrow$ classical radius ของ e^- .

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$$

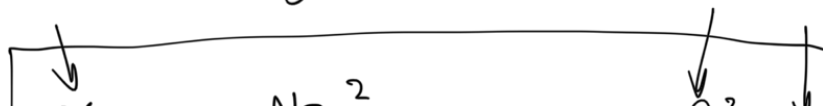
ในนี้ $\vec{B} \parallel \hat{z}$

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle$$

ถ้า ระบบมี spherical symmetry \leftarrow

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle r^2 \rangle = \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle$$



$$\Rightarrow \chi = -\frac{NZe}{4mc^2} \cdot \frac{\Delta(r^2)}{3} = -\frac{(NZe)^2}{6mc^2} r^2$$

Quantum :

ในเมทริกซ์ของ \vec{e} เปลี่ยนไป ถ้ามี applied magnetic field.

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c}$$

Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2$$

ให้ $\vec{B} = B\hat{z}$ $\vec{B} \parallel \hat{z}$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

$$A_x = -\frac{1}{2}yB, \quad A_y = \frac{1}{2}xB, \quad A_z = 0$$

หรือ

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}$$

$$\Rightarrow \mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{2c} \vec{r} \times \vec{B} \right)^2$$

$$= \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2m} \cdot \frac{e}{2c} \left(\vec{p} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) + (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{p} \right)$$

$$+ \frac{1}{2m} \cdot \frac{e^2}{4c^2} (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot (\vec{r} \times \vec{B})$$

พิจารณา $\frac{e}{4mc} (\vec{p} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) + (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{p})$

$A \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C}$

$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$\vec{p} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) = (\vec{p} \times \vec{r}) \cdot \vec{B} = -(\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{B}$

$\Rightarrow \frac{e}{4mc} (\vec{p} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) + (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{p}) = \frac{e}{2mc} (-\vec{L} \cdot \vec{B})$

พิจารณา

$\frac{e^2}{8mc^2} (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) = \frac{e^2}{8mc^2} r^2 B^2 = \frac{e^2 B^2}{8mc^2} (x^2 + y^2 + z^2)$

$(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot (\vec{C} \times \vec{D}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})(\vec{B} \cdot \vec{D}) - (\vec{A} \cdot \vec{D})(\vec{B} \cdot \vec{C})$

$\Rightarrow \mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} + \frac{e^2 B^2}{8mc^2} (x^2 + y^2 + z^2)$

↑ angular momentum

↑ diamagnetism

↑ paramagnetism $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$

ขอพลังงานทั้งหมด function ของ B.

$M = - \frac{\partial E_B}{\partial B}$ (statistical mech)

$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

$e^{-E/k_B T}$

$M = N \langle \mu \rangle$

$\langle \mu \rangle = \frac{\sum \mu e^{\mu B/k_B T}}{\sum e^{\mu B/k_B T}}$

$E_B = \langle \phi_0 | H_3 | \phi_0 \rangle$

↗ ground state.

$= \frac{e^2 B^2}{8mc^2} \langle \phi_0 | (x^2 + y^2) | \phi_0 \rangle.$

$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$

$x^2 + y^2 = \frac{2}{3} r^2$

$= \frac{e^2 B^2}{12mc^2} \langle \phi_0 | r^2 | \phi_0 \rangle.$

ผลลัพธ์ของ 1 atom

$\epsilon_B = \frac{e^2 B^2}{12mc^2} \langle r^2 \rangle$

ถ้าผลลัพธ์ของ $Z e^-$ ใน N atom.

$\Rightarrow E_B = ZN \epsilon_B = \frac{ZNe^2 B^2}{12mc^2} \langle r^2 \rangle$

$M = - \partial E_B = \frac{2ZNe^2 B}{12mc^2}$

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial B} = - \frac{Z N \mu_B}{6 m c^2} \langle r^2 \rangle B$$

$$\Rightarrow \chi = - \frac{Z N e^2}{6 m c^2} \langle r^2 \rangle$$

Spin : intrinsic property ของ e^-
(เหมือนกระจก)

electron ที่มี spin ยึดอยู่ในสารได้ 2 แบบ.

- localized electron \Rightarrow พอล insulator.
 \Rightarrow magnetic moment (spin) ก็ localized
- itinerant electron \Rightarrow พอล metal
 \Rightarrow magnetic moment ก็ เคลื่อนที่ไปได้.

Paramagnetism พิจารณากรณีที่มี localized electron.

พิจารณาการจัดเรียง e^- ใน atom โดยใช้ Hund Rules

1. Maximize S.
2. Maximize L (แต่ต้องไปดูข้อ 1 ก่อน).
3. total angular momentum.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$L=1 \quad S=1/2 \quad J = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$$

$$L=3 \quad S=1/2 \quad J = \frac{7}{2}, \frac{5}{2}$$

$$L_1=4 \quad L_2=1 \quad J = \frac{11}{2}, \frac{9}{2}, \frac{7}{2}, \frac{5}{2}$$

$$J = L + S$$

-5, -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3,

$S = \frac{1}{2}$ L $J = L + S$ หรือ $|L - S|$
 ถ้า less-than-half filled ↑ $J = |L - S|$ ↑
 more-than-half filled $J = L + S$

พิจารณา d-orbital $l = 2$

↑↓ $m_l = 2$

↑↓ $m_l = 1$

↑↓ $m_l = 0$

↑↓ $m_l = -1$

↑↓ $m_l = -2$

spin-orbit

∝ $\vec{L} \cdot \vec{S}$

จำนวน \bar{n}

1

2

3

4

5

6

7

10

S

$1/2$

1

$3/2$

2

$5/2$

2

$3/2$

0

$(L) = |\sum m_l|$

2

3

3

2

0

2

3

⋮

0

↓
J

$3/2$

2

$3/2$

0

$5/2$

4

$9/2$

0

↓
2S+1 χ_J

$^2 D_{3/2}$

$^3 F_2$

$^4 F_{3/2}$

$^5 D_0$

$^6 S_{5/2}$

$^5 D_4$

$^4 F_{9/2}$

$^1 S_0$

หรือ transition elemental (d-orbital)

... quenched ⇒ average value 0.

$\Rightarrow L$ จะแทน frequency & average spin \checkmark .

\Rightarrow magnetic moment จะมาจาก spin only.

\Rightarrow magnetic moment เกิดจาก unpaired e^- เท่านั้น.

โดยทั่วไป เราจะพิจารณาค่า J เพื่อหา magnetic moment ของสาร.

พิจารณากรณีที่ 2 ของ H เทียบด้วย H_J

$$H_J = g \frac{e\hbar}{2mc} \cdot \vec{J} \cdot \vec{B}$$

quantum number
 $m_J = -J, -J+1, -J+2, \dots, J-1, J.$

Lande' constant.

$$g = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left[\frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)} \right]$$

ถ้า $L=0$ $S=J$ $\Rightarrow g=2$

ค่า g ของ e^- จะมีค่าเท่ากับ 2.

$$L \Rightarrow \vec{L} + \vec{S}$$

$$\Rightarrow H_J = - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

↑
magnetic moment.

$$\Rightarrow \vec{\mu} = -g \mu_B \vec{J} \quad ; \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

↑
Bohr magneton.

หรือ

$$\vec{\mu} = \gamma \hbar \vec{J}$$

$$\dots = \gamma \hbar$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow -\gamma \mu_B &= \mu_N \quad \downarrow \\ \Rightarrow \gamma &= \frac{-g \mu_B}{\hbar} = \frac{-g e}{2mc} \end{aligned}$$

↑
gyromagnetic ratio

เนื่องจาก \vec{J} quantized \Rightarrow พลังงานของระบบที่ \mathcal{H}_J quantized ด้วย.

ดังนั้นใช้ statistical mechanics ในการศึกษาพลังงานเฉลี่ยที่ T .

\Rightarrow ศึกษา free energy $F \equiv \mathcal{F}$

$$e^{-\beta F} = \sum_{m_j = -J}^{+J} e^{-\beta g \mu_B B m_j} = \sum_{m_j = -J}^{+J} \mathcal{Z}$$

จาก $\mathcal{H}_J = -g \mu_B \vec{J} \cdot \vec{B}$
 ในที่ $\vec{B} = B \hat{z}$
 $\Rightarrow E = -g \mu_B B m_j$ โดยที่ $m_j = -J, \dots, J$

$$\begin{aligned} \Rightarrow e^{-\beta F} &= \frac{e^{\beta g \mu_B B J} - e^{-\beta g \mu_B B (J+1)}}{1 - e^{-\beta g \mu_B B}} \times \frac{e^{\frac{1}{2} \beta g \mu_B B}}{e^{\frac{1}{2} \beta g \mu_B B}} \\ &= \frac{e^{\beta g \mu_B B (J + \frac{1}{2})} - e^{-\beta g \mu_B B (J + \frac{1}{2})}}{e^{\frac{1}{2} \beta g \mu_B B} - e^{-\frac{1}{2} \beta g \mu_B B}} \\ &= \frac{\sinh(\beta g \mu_B B (J + \frac{1}{2}))}{\sinh(\frac{1}{2} \beta g \mu_B B)} \end{aligned}$$

στην $(\mu_B B / 2)$.

$$\Rightarrow F = -\frac{1}{\beta} \left[\log \left\{ \sinh \left[\beta g \mu_B B \left(J + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} - \log \left\{ \sinh \left[\beta g \mu_B B / 2 \right] \right\} \right]$$

$$M = -N \frac{\partial F}{\partial B}$$

$$= \frac{N}{\beta} \left[\frac{\cosh \left[\beta g \mu_B B \left(J + \frac{1}{2} \right) \right]}{\sinh \left[\beta g \mu_B B \left(J + \frac{1}{2} \right) \right]} \cdot \beta g \mu_B \left(J + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\left[- \frac{\cosh \left[\beta g \mu_B B / 2 \right]}{\sinh \left[\beta g \mu_B B / 2 \right]} \cdot \beta g \mu_B / 2 \right]$$

$$= N g \mu_B \left[\frac{2J+1}{2} \coth \left[\beta g \mu_B B \left(J + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{2} \coth \left(\beta g \mu_B B / 2 \right) \right]$$

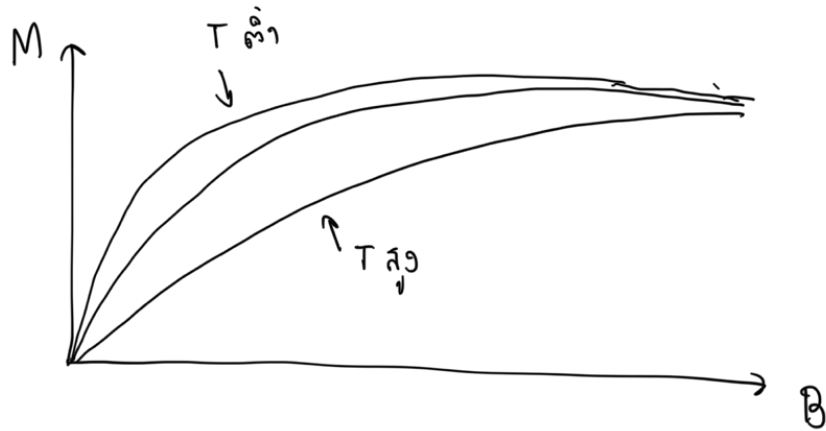
$$= N g \mu_B J \left\{ \left(\frac{2J+1}{2J} \right) \coth \left[\beta g \mu_B B J \left(\frac{2J+1}{2J} \right) \right] - \left(\frac{1}{2J} \right) \coth \left[\frac{\beta g \mu_B B J}{2J} \right] \right\}$$

$$\rightarrow \boxed{M = N g \mu_B J \cdot B_J \left(\beta g \mu_B B J \right)}$$

$B_J(x)$ ñò Brillouin function ðáññ

$\left[\dots \right]$

$$\rightarrow B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \left(\coth \left(x \cdot \frac{2J+1}{2J} \right) - \frac{1}{2J} \coth \left(\frac{x}{2J} \right) \right)$$



ถ้า $x \rightarrow \infty$ $B_J(x) \rightarrow 1,$
 ถ้า $B \rightarrow \infty$ $M \rightarrow Ng\mu_B J$ ← saturated magnetization

ถ้า x มีค่าน้อย $x \ll 1,$ ←
 หรือ B มีค่าน้อย ๆ.

$$\coth x \sim \frac{1}{x} + \frac{x}{3} \quad \text{ถ้า } x \ll 1.$$

$$B_J(x) \approx \frac{2J+1}{2J} \left[\left(\frac{2J+1}{2J} x \right)^{-1} + \frac{2J+1}{2J} \cdot \frac{x}{3} \right]$$

$$- \frac{1}{2J} \left[\left(\frac{x}{2J} \right)^{-1} + \frac{1}{2J} \cdot \frac{x}{3} \right].$$

$$= \frac{1}{x} + \left(\frac{2J+1}{2J} \right)^2 \cdot \frac{x}{3} - \frac{1}{x} - \frac{1}{(2J)^2} \cdot \frac{x}{3}$$

$$= \frac{(2J+1)^2 - 1}{(2J)^2} \cdot \frac{x}{3}$$

$$= \frac{4J^2 + 4J - 1}{(2J)^2} \cdot \frac{x}{3}$$

$$= \frac{4J^2}{4J^2} \cdot \frac{1}{3}$$

$$B_J(x) \approx \frac{J+1}{J} \cdot \frac{x}{3}$$

$B \ll 1$

$$\Rightarrow M = N g \mu_B J \cdot \frac{J+1}{3} \cdot \frac{B g \mu_B J}{3}$$

$$M = \frac{N (g \mu_B)^2}{3} \frac{J(J+1)}{k_B T} \cdot B$$

$= \chi$

$$\Rightarrow \chi = \frac{N (g \mu_B)^2}{3} \frac{J(J+1)}{k_B T}$$

Curie's law. $\Rightarrow \chi \propto \frac{1}{T}$

จาก experiment

$$\chi = \frac{C}{T}$$

โดยที่ $C = \frac{N}{3} \frac{\mu_B^2}{k_B T} p^2$; $p = g J(J+1)$

Itinerant magnetic moments.

$\hookrightarrow e^-$ (spin) ใน metal (conductor).

หรือ จำนวนของ e^- ที่มี spin-up n_+

spin-down n_-

$$M = -\mu_B(n_+ - n_-)$$

ให้ $g_{\pm}(E) dE$ เป็น density ของ e^- ที่มี spin-up (+) และ spin-down (-) ภายใน range ของพลังงาน ระหว่าง E และ $E + dE$.

ที่ $\vec{B} = 0$

ถ้า density ของ e^- ทั้งหมด = $g(E)$

$$g_{\pm}(E) = \frac{1}{2}g(E)$$

$$\rightarrow M = 0$$

ถ้า $\vec{B} \neq 0$

จาก $E_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

$$E \rightarrow E_B = E \begin{matrix} \text{spin-up} \\ \uparrow \\ \mu_B B \\ \downarrow \\ \text{spin-down} \end{matrix}$$

$$g_{\pm}(E) = \frac{1}{2}g(E \mp \mu_B B)$$

ประมาณว่า $E_F \gg \mu_B B$ พลังงานของ E_F

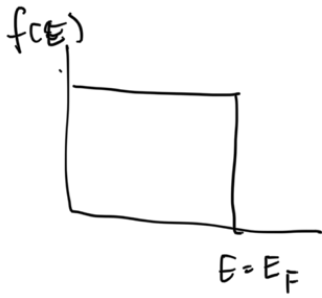
$$g(E \mp \mu_B B) = \frac{1}{2}g(E) \mp \frac{1}{2}\mu_B B \frac{dg}{dE}$$

Taylor's expansion.

ให้ $\eta = n_+ - n_-$

$$n_+ - n_- = \int (n_+(E) - n_-(E)) dE \sim \int \dots$$

ความหนาแน่นของสถานะ $n_{\pm} = \int g_{\pm}(E) f(E) dE$



$$\Rightarrow n = \int (g_+ - g_-) dE$$

$$= -\mu_B B \int \frac{dg}{dE} dE$$

$$= -\mu_B B \cdot g(E_F)$$

$$M = -\mu_B (n_+ - n_-) = -\mu_B n$$

$$= \underbrace{\mu_B^2 g(E_F)} B$$

$$\Rightarrow \chi = \underbrace{\mu_B^2}_{\uparrow \text{Pauli}} \underbrace{g(E_F)}_{\downarrow} \leftarrow \text{paramagnetic temperature-independent}$$

itinerant electrons มี diamagnetism ล้อๆ
 เนื่องจาก e^- จะมีกาอเคลื่อนที่ในทิศทางแม่เหล็ก ที่สร้างลหภาพ
 ทำกับ applied magnetic field.

เทียบค่า Landau diamagnetism.

$$\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3} \chi_{\text{Pauli}}$$

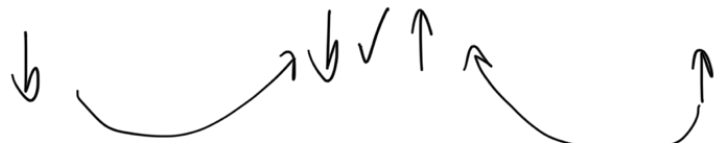
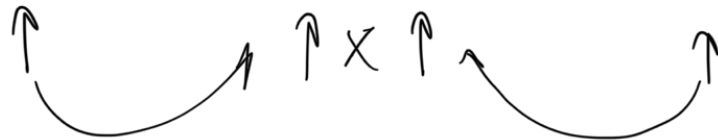
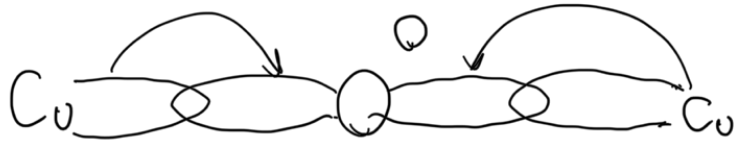
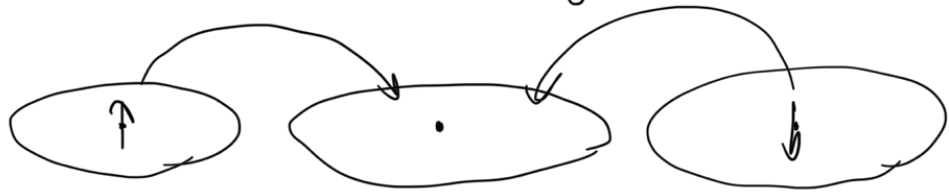
Interacting spins (magnetic moments).

- dipole-dipole interaction \propto

range : infinite

strength : small

... singlet coupling



hopping

- spin delocalization of e^-

\Rightarrow minimized kinetic energy.

$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$

\leftarrow eigenstate of \mathcal{H}



\leftarrow better eigenstate of \mathcal{H} .



\leftarrow frustrated.



singlet - triplet.

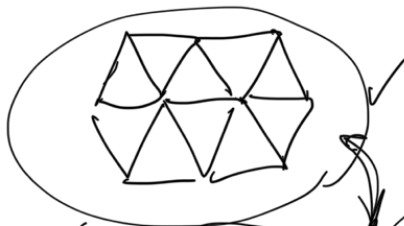
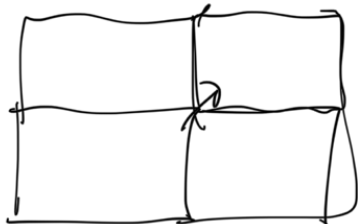
$\uparrow \quad \uparrow$

\Rightarrow $(\uparrow\uparrow)$ $(\downarrow\downarrow)$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$ \leftarrow triplet

$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$ \leftarrow singlet.

$(\uparrow\downarrow)$...

↩️ \vec{S}_i or eigenstate



Kagome lattice

coupling

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = \sum_{\langle i, j \rangle} J S_i^z S_j^z$$

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{J} \cdot \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$