

Propiedades Eléctricas y  
Magnéticas de los Materiales

---

*Hugo Flores*  
*Antonio Gonzales*  
*Alejandro Kunold*

Escrito con L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub>



# Introducción

El objetivo de estas notas es apoyar al alumno durante el curso de Propiedades Eléctricas y Magnéticas de la Materia. No comprende todos los temas del programa de la materia.

En muchas de las secciones hay contribuciones que se hicieron a través de las tareas de alumnos o bien por notas elaboradas en servicios sociales.

Es importante destacar la colaboración de

- Hugo Flores Ruiz contribuyó transcribiendo a  $\text{\LaTeX}$  y revisando varios manuscritos de las secciones 1.1 a la 1.10.
- José Antonio Gonzales Martínez contribuyó transcribiendo a  $\text{\LaTeX}$  y revisando varios manuscritos de las secciones 1.11 a la 3.1.



# Objetivos

Los objetivos de estas notas son:

1. Estudiar a los materiales que tienen respuesta al campo eléctrico.
2. Enumerar las distintas respuestas que pueden presentar los materiales al campo eléctrico.
3. Estudiar el origen de la respuesta de los materiales al campo eléctrico.
4. Estudiar a los materiales que tienen respuesta al campo magnético.
5. Enumerar las distintas respuestas que pueden presentar los materiales al campo magnético.
6. Estudiar el origen de la respuesta de los materiales al campo magnético.



# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>I</b>
<b>Objetivos</b>	<b>III</b>
<b>1. Respuesta al Campo Eléctrico</b>	<b>5</b>
1.1. El campo electrostático en medios dieléctricos . . . . .	5
1.1.1. Repaso . . . . .	5
1.1.2. Polarización . . . . .	7
1.1.3. Campo externo de un medio dieléctrico . . . . .	8
1.1.4. Ley de Gauss en un Dieléctrico . . . . .	12
1.1.5. Susceptibilidad Eléctrica y Constante Dieléctrica . . . . .	13
1.2. Teoría Microscópica de los Dieléctricos . . . . .	14
1.2.1. Campo Molecular en un Dieléctrico . . . . .	14
1.3. Polarizabilidad por casos . . . . .	16
1.3.1. Polarizabilidad Electrónica . . . . .	16
1.3.2. Polarizabilidad Dipolar . . . . .	17
1.3.3. Cristales Iónicos . . . . .	17
1.4. Polarización en función de la temperatura . . . . .	18
1.4.1. Moléculas polares . . . . .	18
1.5. Ferroelectricidad . . . . .	19
1.6. Polarones . . . . .	20
1.7. Función Dieléctrica . . . . .	22
1.8. Introducción a la energía libre de Helmholtz . . . . .	24
1.9. Procesos reversibles . . . . .	24
1.10. Teoría de Landau de Transiciones de Fase . . . . .	26
1.10.1. Primer Orden . . . . .	26
1.10.2. Segundo orden . . . . .	26
1.11. Polarones: Modos transversales y longitudinales de vibración . . . . .	27
1.12. Caso Iónico . . . . .	29
<b>2. Respuesta al Campo Magnético</b>	<b>31</b>
2.1. Las corrientes de magnetización $\mathbf{j}_M$ y $\mathbf{J}_M$ . . . . .	31
2.2. El campo $\mathbf{H}$ y condiciones de continuidad. . . . .	35
2.3. Energía de un dipolo en un campo magnético . . . . .	37

2.4. El campo magnético molecular . . . . .	39
2.5. El diamagnetismo de Langevin . . . . .	41
2.6. Paramagnetismo . . . . .	43
2.7. Ferromagnetismo . . . . .	47
<b>3. Transporte Eléctrico</b>	<b>57</b>
3.1. Conductividad Eléctrica . . . . .	57



# Índice de figuras

1.1. Geometría para calcular el campo eléctrico (vease 1.4) de dos cargas puntuales separadas una distancia $ \vec{l} $ . . . . .	6
1.2. El campo eléctrico en $(x,y,z)$ se puede calcular sumando las contribuciones debidas a los diversos de volumen $\Delta V'$ en $V_0$ se denota por $S_0$ . . . . .	9
1.3. Construcción de una superfie Gaussiana S en un medio dieléctrico . . . . .	11
2.1. . . . . .	34
2.2. . . . . .	36
2.3. . . . . .	37
2.4. . . . . .	37
2.5. . . . . .	38
2.6. . . . . .	40
2.7. . . . . .	42
2.8. . . . . .	44
2.9. . . . . .	48
2.10. . . . . .	50
2.11. . . . . .	53
2.12. . . . . .	53
3.1. . . . . .	58



# Capítulo 1

## Respuesta al Campo Eléctrico

### 1.1. El campo electrostático en medios dieléctricos

#### 1.1.1. Repaso

Ecuaciones de campo eléctrico y potencial eléctrico de una distribución volumétrica de carga

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V \frac{\vec{r} - \vec{r}^*}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} \rho(\vec{r}^*) dV^* \quad (1.1)$$

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V \frac{\rho(\vec{r}^*)}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} dV^* \quad (1.2)$$

Ecuación de Gauss

$$\epsilon_0 \oint_S \vec{E} \cdot \vec{n} da = Q \quad (1.3)$$

El Dipolo eléctrico

Dos cargas iguales y de signo contrario a una pequeña distancia de separación forman un dipolo eléctrico. El campo eléctrico por tal distribución está dado por (ver la figura 1.1)

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{\vec{r} - \vec{r}^* - \vec{l}}{|\vec{r} - \vec{r}^* - \vec{l}|^3} - \frac{\vec{r} - \vec{r}^*}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} \right\} \quad (1.4)$$

para cualquier valor de  $q$  y cualquier valor de separación  $\vec{l}$ . Ahora hacemos una aproximación en la que  $|\vec{l}| \ll |\vec{r} - \vec{r}^*|$  por lo que podemos desarrollar a 1.4 a primer orden como lo notamos a continuación.

$$\begin{aligned} |\vec{r} - \vec{r}^* - \vec{l}|^{-3} &= [(\vec{r} - \vec{r}^*)^2 - (2\vec{r} - 2\vec{r}^*) \cdot \vec{l} + l^2]^{-\frac{3}{2}} \\ &= |\vec{r} - \vec{r}^*|^{-3} \left[ 1 - \frac{2(\vec{r} - \vec{r}^*) \cdot \vec{l}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^2} + \frac{l^2}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^2} \right] \\ &= |\vec{r} - \vec{r}^*| \left\{ 1 + \frac{3(\vec{r} - \vec{r}^*) \cdot \vec{l}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} + \dots \right\} \end{aligned} \quad (1.5)$$

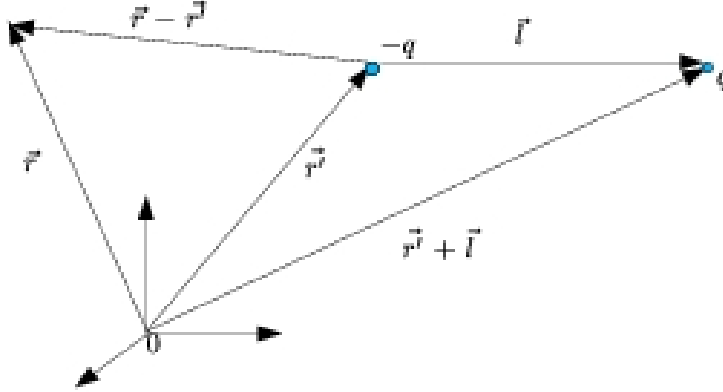


Figura 1.1: Geometría para calcular el campo eléctrico (vease 1.4) de dos cargas puntuales separadas una distancia  $|\vec{l}|$ .

Por lo que al sustituir 1.5 en 1.4 tenemos lo siguiente:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{3(\vec{r} - \vec{r}^*) \cdot \vec{l}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^5} (\vec{r} - \vec{r}^*) - \frac{\vec{l}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} + \dots \right\} \quad (1.6)$$

y definimos al producto de  $q$  y  $\vec{l}$  como  $\vec{p}$

$$\vec{p} = q\vec{l} \quad (1.7)$$

y a 1.7 le llamamos "momento dipolar", por lo que 1.6 la podemos escribir como:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{3(\vec{r} - \vec{r}^*) \cdot \vec{p}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^5} (\vec{r} - \vec{r}^*) - \frac{\vec{p}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} + \dots \right\} \quad (1.8)$$

La distribución de potencial distribuida por las dos cargas puntuales (ver figura 1.1), también es importante de estudiar. La distribución de potencial para este dipolo es el siguiente:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}^* - \vec{l}|} - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} \right] \quad (1.9)$$

Desarrollando el primer término de 1.9 a primer orden como se hizo en 1.5 y con ayuda de 1.7 podemos escribir a 1.9 como:

$$\varphi(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\vec{r} - \vec{r}^*) \cdot \vec{l}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}^*)}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} \quad (1.10)$$

La ecuación 1.10 nos da el potencial de un dipolo eléctrico, de este potencial puede estimarse el campo eléctrico 1.5. También resulta de interés estudiar la energía potencial de un dipolo eléctrico que se coloca en un campo eléctrico externo, esto es

$$U = -q\varphi_{ext}(\vec{r}) + q\varphi_{ext}(\vec{r} + \vec{l}) \quad (1.11)$$

Si consideramos que  $|\vec{l}| \ll |\vec{r}|$  podemos desarrollar a  $\varphi(\vec{r} + \vec{l})$  en serie de potencias considerando los dos primeros términos es decir:

$$\varphi_{ext}(\vec{r} + \vec{l}) = \varphi_{ext} + \vec{l} \cdot \nabla \varphi_{ext} \quad (1.12)$$

por lo que podemos escribir a 1.11 como:

$$U = q\vec{l} \cdot \nabla \varphi_{ext} = -\vec{p} \cdot \vec{E}_{ext}(\vec{r}) \quad (1.13)$$

### 1.1.2. Polarización

Un material dieléctrico ideal es aquel que no tiene cargas libres. Sin embargo, todos los medios naturales se componen de moléculas, estas a su vez se componen de entes cargados (núcleos atómicos y electrones), y las moléculas de los dieléctricos son, de hecho, afectadas por la presencia de un campo eléctrico. El campo eléctrico produce una fuerza que se ejerce sobre cada partícula cargada, empujando las partículas positivas en la dirección del campo, y las negativas en sentido opuesto, de modo que las partes positivas y negativas de cada molécula se desplazan de sus posiciones de equilibrio en sentidos opuestos, sin embargo estos desplazamientos están limitados (en la mayoría de los casos, a fracciones muy pequeñas de un diámetro molecular) por intensas fuerzas restauradoras que se forman por el cambio de la configuración de las cargas de la molécula. El término carga ligada, en contraste con la carga libre de un conductor, se usa a veces para poner énfasis en el hecho de que tales cargas moleculares no están libres para moverse muy lejos o ser extraídas del material dieléctrico. El efecto total, desde el punto de vista macroscópico, es fácil de visualizar de visualizar como un desplazamiento de toda la carga positiva en el dieléctrico en relación con la carga negativa. Se dice entonces que el dieléctrico está polarizado.

Un dieléctrico polarizado, aun cuando sea eléctricamente neutro en promedio, produce indudablemente un campo eléctrico en los puntos exteriores e interiores al dieléctrico. Es decir la polarización del dieléctrico depende del campo eléctrico total del medio, pero una parte del campo eléctrico es producida por el mismo dieléctrico.

En esta subsección veremos la polarización de un material dieléctrico en escala macroscópica.

Definamos la polarización  $\vec{P}$  como:

$$\vec{P} = \frac{\Delta \vec{p}}{\Delta v} \quad (1.14)$$

donde:

$$\Delta \vec{p} = \int_{\Delta V} dq \vec{r} \quad (1.15)$$

es el momento dipolar eléctrico de un elemento de volumen  $\Delta V$ .

A un cuando  $\Delta V$  se considere muy pequeño desde el punto de vista macroscópico, contiene aún muchas moléculas. A veces conviene hablar del momento dipolar de una sola molécula y la definimos como:

$$\vec{p}_m = \int_{molecula} dq\vec{r} \quad (1.16)$$

de forma tal que la ecuación 1.15 la podemos escribir como:

$$\Delta\vec{p} = \sum \vec{p}_m$$

pues la suma incluye todas las moléculas contenidas en el elemento de volumen  $\Delta V$  en consecuencia la ecuación 1.14 la podemos escribir como:

$$\vec{P} = \frac{\sum_m \vec{p}_m}{\Delta V} = \frac{\Delta\vec{p}}{\Delta V} \quad (1.17)$$

### 1.1.3. Campo externo de un medio dieléctrico

Consideremos ahora un pedazo finito de material dieléctrico polarizado; es decir que se caracterize en cada punto  $\vec{r}^*$  por una polarización  $\vec{P}(\vec{r}^*)$  la polarización da origen a un campo eléctrico, y nuestro problema es calcular este campo en un punto  $\vec{r}$ , que está fuera de la masa del dieléctrico (ver figura 1.2). Cada elemento de volumen  $\Delta V^*$  del dieléctrico se caracteriza por un momento dipolar  $\Delta\vec{p} = \vec{P}\Delta V^*$  y como la distancia entre  $(x, y, z)$  y  $\Delta V^*$  es grande comparada con las dimensiones de ésta última, el momento dipolar determina completamente la contribución de los  $\Delta V^*$  al potencial por lo que el potencial debido a un elemento de volumen del cuerpo a una distancia  $|\vec{r} - \vec{r}^*|$  es:

$$\Delta\varphi(\vec{r}) = \frac{\Delta\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}^*)}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}^*|^3} = \frac{\vec{P}(\vec{r}^*) \cdot (\vec{r} - \vec{r}^*)\Delta V^*}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}^*|^3} \quad (1.18)$$

El potencial total debido al cuerpo de volumen  $V_0$  es:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{V_0} \frac{\vec{P}(\vec{r}^*) \cdot (\vec{r} - \vec{r}^*)dV^*}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} \quad (1.19)$$

Ahora mediante algunas transformaciones matemáticas se escribirá a 1.19 en una forma más práctica de visualizar. Primero comenzamos trabajando el término

$$\nabla^* \left( \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} \right) = \frac{\vec{r} - \vec{r}^*}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} \quad (1.20)$$

por lo que el integrando de 1.19 lo podemos escribir como:

$$\frac{\vec{P} \cdot (\vec{r} - \vec{r}^*)}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} = \vec{P} \cdot \nabla^* \left( \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} \right) \quad (1.21)$$

y nos ayudamos de la siguiente entidad vectorial

$$\nabla^* \cdot (f\vec{R}) = f\nabla^* \cdot \vec{R} + \vec{R} \cdot \nabla^* f \quad (1.22)$$

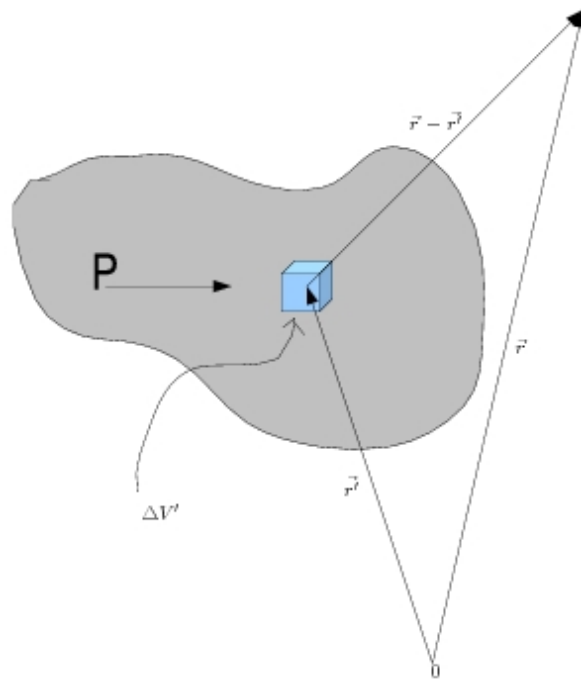


Figura 1.2: El campo eléctrico en  $(x,y,z)$  se puede calcular sumando las contribuciones debidas a los diversos de volumen  $\Delta V'$  en  $V_0$  se denota por  $S_0$

en donde  $f$  es una función escalar diferenciable y  $\vec{F}$  un potencial vectorial, por lo que 1.21 lo podemos escribir como:

$$\frac{\vec{P} \cdot (\vec{r} - \vec{r}^*)}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} = \nabla^* \cdot \left( \frac{\vec{P}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} \right) - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} \nabla^* \cdot \vec{P} \quad (1.23)$$

y si ahora sustituimos a 1.23 en 1.19 obtenemos que:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \int_{V_0} \nabla^* \cdot \left( \frac{\vec{P}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} \right) dv^* - \int_{V_0} \frac{\nabla^* \cdot \vec{P}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} dv^* \right\} \quad (1.24)$$

Aplicando el teorema de la divergencia al primer elemento del segundo miembro, podemos escribir a 1.24 como:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \int_{S_0} \frac{\vec{P} \cdot \vec{n}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} da^* + \int_{V_0} \frac{-\nabla^* \cdot \vec{P}}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} dv^* \right\} \quad (1.25)$$

Las cantidades  $\vec{P} \cdot \vec{n}$  y  $-\nabla^* \cdot \vec{P}$  que aparecen en las integrales de 1.26 son dos funciones escalares obtenidas a partir de la polarización  $\vec{P}$  y como tienen unidades de carga por unidad de area y carga por unidad de volumen respectivamente, entonces se define a:

$$\sigma_p \equiv \vec{P} \cdot \vec{n} = P_n \quad (1.26)$$

$$\rho_p \equiv -\nabla^* \cdot \vec{P} \quad (1.27)$$

y llamamos ha 1.26 y 1.27 como densidades de carga de polarización. La densidad superficial de carga de polarización está dada por la componente de polarizacion normal a la superficie, y la densidad volumetrica de carga de polarización es una medida de la no uniformidad de la polarización dentro del material. Entonces por 1.26 y 1.27 podemos escribir a 1.25 como:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \int_{S_0} \frac{\sigma_p}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} da^* + \int_{V_0} \frac{\rho_p}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} dv^* \right\} \quad (1.28)$$

Ahora procedemos a calcular el campo eléctrico de la forma  $\vec{E}(\vec{r}) = -\nabla\varphi(\vec{r})$  y notando que  $\nabla$  actua sobre las variables no primadas tenemos  $\nabla \left( \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} \right) = -\nabla^* \left( \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} \right)$  y empleando la ecuación 1.20 obtenemos a partir de 1.28 el campo eléctrico dado por:

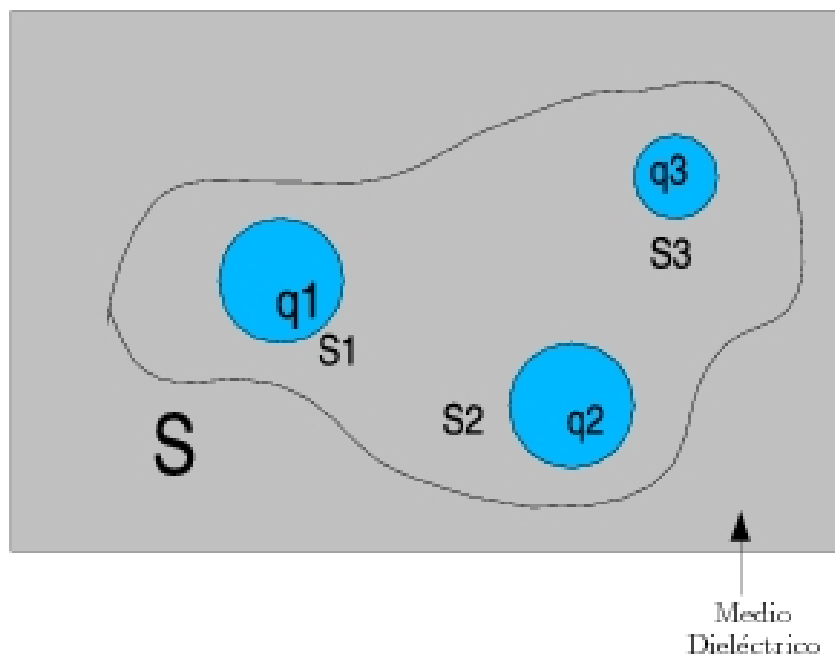
$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \int_{S_0} \frac{\sigma_p (\vec{r} - \vec{r}^*)}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} da^* + \int_{V_0} \frac{\rho_p (\vec{r} - \vec{r}^*)}{|\vec{r} - \vec{r}^*|^3} dv^* \right\} \quad (1.29)$$

Es importante acotar que la carga total en el dieléctrico total  $Q_p$  es cero esto es:

$$Q_p = \int_{V_0} (-\nabla^* \cdot \vec{P}) dv^* + \oint_{S_0} \vec{P} \cdot \vec{n} da^* = 0 \quad (1.30)$$

aplicando el teorema de la divergencia.



Figura 1.3: Construcción de una superficie Gaussiana  $S$  en un medio dieléctrico

### 1.1.4. Ley de Gauss en un Dieléctrico

En la figura 1.3 la superficie de trazos  $S$  es una superficie cerrada imaginaria colocada dentro de un medio dieléctrico. Consideremos cierta cantidad de carga libre  $Q$ , contenida en el volumen limitado por  $S$  y supongamos que esta carga libre se encuentra en las superficies de los tres conductores en las cantidades  $q_1$ ,  $q_2$  y  $q_3$  y por ley de Gauss.

$$\oint_S \vec{E} \cdot \vec{n} da = \frac{1}{\epsilon_0} (Q + Q_p) \quad (1.31)$$

donde  $Q = q_1 + q_2 + q_3$  es la carga libre y  $Q_p$  es la carga de polarización dada por:

$$Q_p = \int_V (-\nabla \cdot \vec{P}) dv + \int_{S_1+S_2+S_3} \vec{P} \cdot \vec{n} da \quad (1.32)$$

en 1.32 es el volumen del dieléctrico encerrado por  $S$ , no hay limitación del material dieléctrico en  $S$ , de modo que la integral de superficie no contiene una contribución de  $S$ . Al aplicar el teorema de la divergencia al primer término del miembro de 1.32 tenemos que:

$$\begin{aligned} Q_p &= \int_{S+S_1+S_2+S_3} -P \cdot \vec{n} da + \int_{S_1+S_2+S_3} \vec{P} \cdot \vec{n} da \\ &= -\oint_S P \cdot \vec{n} da - \int_{S_1+S_2+S_3} P \cdot \vec{n} da + \int_{S_1+S_2+S_3} \vec{P} \cdot \vec{n} da \\ &= -\oint_S \vec{P} \cdot \vec{n} da \end{aligned} \quad (1.33)$$

por lo que al sustituir 1.33 en 1.31 tenemos que:

$$\oint_S \vec{E} \cdot \vec{n} da = \frac{1}{\epsilon_0} (Q - \oint_S \vec{P} \cdot \vec{n} da) \quad (1.34)$$

la cual la podemos escribir como:

$$\oint_S (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) \cdot \vec{n} da = Q \quad (1.35)$$

y definimos  $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$  como el vector de Desplazamiento Eléctrico, el cual tiene las mismas unidades que  $\vec{P}$  por lo que 1.35 lo podemos escribir como:

$$\oint_S \vec{D} \cdot \vec{n} da = Q \quad (1.36)$$

la ecuación 1.36 nos dice que el flujo del vector  $\vec{D}$ , que pasa por una superficie cerrada, es igual a la carga libre total introducida en el volumen cerrado por la superficie. al aplicar el teorema de la divergencia sobre 1.36 y si  $Q$  esta distribuida con una densidad de carga  $\rho$  obtenemos:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (1.37)$$

a 1.37 se le llama forma diferencial de la ley de Gauss. Es conveniente escribir al campo eléctrico  $\vec{E}$  en función de  $\vec{D}$  y  $\vec{P}$  esto es:

$$\vec{E}(x, y, z) = \frac{1}{\epsilon_0} \vec{D}(x, y, z) - \frac{1}{\epsilon_0} \vec{P}(x, y, z) \quad (1.38)$$

### 1.1.5. Susceptibilidad Eléctrica y Constante Dieléctrica

El grado de polarización depende no sólo del campo eléctrico, sino de las propiedades de las moléculas que forman el material dieléctrico. Desde el punto de vista macroscópico, el comportamiento del material se especifica completamente por una relación que se determina en forma experimental llamada ecuación constitutiva,  $\vec{P} = \vec{P}(\vec{E})$ , donde  $\vec{E}$  es el campo eléctrico macroscópico, esto es una relación puntual, y si  $\vec{E}$  varía de un punto a otro dentro del material, entonces  $\vec{P}$  varía igualmente. En la mayoría de los materiales,  $\vec{P}$  se anula cuando  $\vec{E}$  se anula. A los materiales los podemos dividir en aquellos con polarización permanente y sin polarización permanente. A los materiales sin polarización permanente los podemos clasificar en isotrópicos y anisotrópicos, y a estos en lineales y no lineales.

En el caso en el que la polarización no es permanente y que la relación entre la polarización y el campo eléctrico externo es puntual tenemos que:  $\vec{E} = \vec{0}$  lo que implica  $\vec{P} = \vec{0}$ . Y podemos escribir la siguiente relación.

$$\vec{P} = \chi(\vec{E})\vec{E} \quad (1.39)$$

con  $\chi(\vec{E})$  es la susceptibilidad eléctrica del material. Ahora analicemos un poco los casos en que el material es isotrópico y lineal.

Para que el material sea lineal  $\chi \equiv \text{constante}$  entonces:

$$\begin{aligned} P_x &= \chi E_x \\ P_y &= \chi E_y \\ P_z &= \chi E_z \end{aligned} \quad (1.40)$$

En el caso isotrópico y no lineal  $\chi \equiv \chi(E)$  tenemos

$$\begin{aligned} P_x &= \chi E_x \\ P_y &= \chi E_y \\ P_z &= \chi E_z \end{aligned} \quad (1.41)$$

En el caso anisotrópico y lineal  $\chi_{ij}$  son constantes con  $i = x, y, z$  y  $j = x, y, z$  tenemos

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi_{xx} & \chi_{xy} & \chi_{xz} \\ \chi_{yx} & \chi_{yy} & \chi_{yz} \\ \chi_{zx} & \chi_{zy} & \chi_{zz} \end{pmatrix} \quad (1.42)$$

por lo que

$$\begin{aligned} P_x &= \chi_{xx}E_x + \chi_{xy}E_y + \chi_{xz}E_z \\ P_y &= \chi_{yx}E_x + \chi_{yy}E_y + \chi_{yz}E_z \\ P_z &= \chi_{zx}E_x + \chi_{zy}E_y + \chi_{zz}E_z \end{aligned} \quad (1.43)$$

En el caso anisotrópico y no lineal tenemos  $\chi_{ij} \equiv \chi_{ij}(E)$  con  $i = x, y, z$  y  $j = x, y, z$  por lo que 1.42 lo podemos escribir como

$$\chi(E) = \begin{pmatrix} \chi_{xx}(E) & \chi_{xy}(E) & \chi_{xz}(E) \\ \chi_{yx}(E) & \chi_{yy}(E) & \chi_{yz}(E) \\ \chi_{zx}(E) & \chi_{zy}(E) & \chi_{zz}(E) \end{pmatrix} \quad (1.44)$$

Ahora analicemos que relación existe entre  $\epsilon_0$  y  $\chi(E)$  en forma general (medio no lineal y anisotrópico) para esto tomemos la definición de  $\vec{D}$  y sustituyamos en esta a 1.39 por lo que obtenemos:

$$\vec{D} = [\epsilon_0 + \chi(E)]\vec{E} \quad (1.45)$$

y definimos

$$\epsilon(E) = \epsilon_0 + \chi(E) \quad (1.46)$$

donde a 1.46 lo llamamos permitividad del medio y tiene las mismas unidades que  $\chi(E)$  y  $\epsilon_0$  por lo que escribimos a 1.46 en la forma

$$\epsilon(E) = \begin{pmatrix} \chi_{xx}(E) + \epsilon_0 & \chi_{xy}(E) & \chi_{xz}(E) \\ \chi_{yx}(E) & \chi_{yy}(E) + \epsilon_0 & \chi_{yz}(E) \\ \chi_{zx}(E) & \chi_{zy}(E) & \chi_{zz}(E) + \epsilon_0 \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

y definimos a  $k$  como la constante dieléctrica dada por

$$k = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \quad (1.48)$$

## 1.2. Teoría Microscópica de los Dieléctricos

Primero debemos de saber como los vectores de campo  $\vec{E}$  y  $\vec{D}$  varían al pasar por una zona interfacial entre dos medios, estos pueden ser dos dieléctricos con diferentes propiedades o un dieléctrico y un conductor. Como se ve en electromagnetismos las condiciones

$$\begin{aligned} (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) \cdot \vec{n}_2 &= \sigma \\ (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \cdot \vec{t} &= 0, \end{aligned} \quad (1.49)$$

donde  $\sigma$  es la densidad superficial de carga externa.

### 1.2.1. Campo Molecular en un Dieléctrico

El campo eléctrico responsable de la polarización de una molécula del dieléctrico se le llamará campo molecular  $\vec{E}_m$ . Este es el campo eléctrico en una posición molecular del dieléctrico; es producido por todas las fuentes externas y moléculas polarizadas del dieléctrico con excepción de la molécula en el punto de consideración. Supongamos que una muestra delgada de dieléctrico se ha polarizado al colocarla en el campo eléctrico uniforme entre dos placas que están opuestamente cargadas, se supondrá que la polarización es uniforme en una escala macroscópica y que  $\vec{P}$  es paralelo al campo que lo produce. La parte del dieléctrico exterior puede sustituirse por un sistema de cargas de polarización, por lo que el campo eléctrico en el centro de la cavidad puede expresarse por

$$\vec{E}_m = \vec{E}_x + \vec{E}_d + \vec{E}_s + \vec{E}', \quad (1.50)$$

donde  $\vec{E}_x$  es el campo eléctrico debido a las placas paralelas;  $\vec{E}_d$  es el campo despolarizante debido a la carga de polarización en las superficies exteriores del dieléctrico,  $\vec{E}_s$  se debe a

la carga de polarización sobre la superficie de la cavidad  $S$  y  $\vec{E}'$  se debe a todos los dipolos que están en el interior de  $S$ . El campo despolarizante también se produce por dos planos paralelos de carga con densidad  $\sigma_p$ . Puesto que  $\sigma_p = P_n = +/ - P$  tenemos que

$$\vec{E}_d = -\frac{1}{\epsilon_0} \vec{P}. \quad (1.51)$$

Expresaremos el campo eléctrico macroscópico en el dieléctrico sin subíndices, esto es  $\vec{E}$ . Como la componente normal del desplazamiento eléctrico  $\vec{D}$  es continua al atravesar la zona interfacial entre el vacío y el dieléctrico, es decir  $D_{n2} - D_{n1} = 0$  y como  $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}_x$  y  $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$ , tenemos

$$\epsilon_0 \vec{E}_x = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}. \quad (1.52)$$

Combinando 1.50, 1.51 y 1.52 se tiene

$$\vec{E}_m = \vec{E} + \vec{E}_s + \vec{E}' \quad (1.53)$$

que es una ecuación que relaciona el campo molecular con el campo eléctrico macroscópico en el material dieléctrico.

Ahora falta calcular  $E_s$  que proviene de una densidad de carga de polarización  $\sigma_p = P_n$  en la superficie esférica  $S$ . Utilizando coordenadas esféricas y tomando el eje polar a lo largo de la dirección de  $\vec{P}$  tenemos

$$\vec{\sigma}_P = \vec{P} \cdot \vec{n} = P \vec{k} \cdot (\sin \theta \cos \varphi \vec{i} + \sin \theta \sin \varphi \vec{j} + \cos \theta \vec{k}) = P \cos \theta, \quad (1.54)$$

y sabemos que podemos calcular el campo eléctrico debido a  $\sigma_P$  como

$$\vec{E}_s = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_S \frac{\sigma_P(\vec{r} - \vec{r}') da'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}, \quad (1.55)$$

pero como queremos saber cuanto vale el campo eléctrico en el origen tenemos que  $\vec{r} = \vec{0}$

$$\begin{aligned} \vec{E}_s &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_S \frac{P \cos \theta \vec{r}' da'}{r'^3} \\ &= -\frac{P}{4\pi\epsilon_0} \int_S \frac{\cos \theta \vec{n} r'^2 \sin \theta d\theta d\varphi}{r'^2} \\ &= -\frac{P}{4\pi\epsilon_0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos \theta \vec{n} \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= -\frac{P}{4\pi\epsilon_0} \vec{k} 2\pi \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{P 2\pi}{4\pi\epsilon_0} \left( -\frac{\cos^3 \theta}{3} \right) \Big|_0^\pi \vec{k} \\ &= \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P}. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Si hay muchos dipolos en la cavidad, si están orientados paralelamente pero distribuidos al azar en su posición y si no hay correlaciones de los dipolos entonces  $\vec{E}' = \vec{0}$ , esta situación puede prevalecer en un gas o un líquido. Similarmente si los dipolos en la cavidad están

situados en las posiciones atómicas regulares de un cristal cúbico, entonces nuevamente  $\vec{E}' = \vec{0}$ . Por lo que 1.53 se reduce a

$$\vec{E}_m = \vec{E} + \frac{1}{3\epsilon_0}\vec{P}. \quad (1.57)$$

El momento dipolar de una molécula por unidad de campo polarizante se llama su polarizabilidad  $\alpha$ , es decir

$$\vec{p}_m = \alpha\vec{E}_m, \quad (1.58)$$

Si hay  $N$  moléculas por unidad de volumen entonces la polarización  $\vec{P} = N\vec{p}_m$ , combinando esta ecuación con 1.58 y 1.57, obtenemos

$$\vec{P} = N\alpha \left( \vec{E} + \frac{1}{3\epsilon_0}\vec{P} \right), \quad (1.59)$$

esta ecuación puede expresarse en función de la constante dieléctrica  $K$ , ya que  $\vec{P} = (K - 1)\epsilon_0\vec{E}$ , de este modo la ecuación 1.59 se convierte en

$$\alpha = \frac{3\epsilon_0(K - 1)}{N(K + 1)} \quad (1.60)$$

### 1.3. Polarizabilidad por casos

La polarizabilidad se separa en cuatro casos principales, esto son

1. Electrónica. Desplazamiento de las capas electrónicas con respecto al núcleo.
2. Iónica. Desplazamiento de un ion cargado con respecto a otro.
3. Dipolar. Viene de moléculas que tiene momento dipolar.
4. Interfacial. Acumulación de carga en interfaces.

#### 1.3.1. Polarizabilidad Electrónica

La densidad de carga para una nube electrónica de radio  $R_0$  es

$$\rho = \frac{Ze}{\frac{4}{3}\pi R_0^3} \quad (1.61)$$

y empleando la ley de Gauss 1.3 tenemos

$$\begin{aligned} \epsilon_0 E_m 4\pi r^2 &= \frac{Zer^3 \frac{4}{3}\pi}{\frac{4}{3}\pi R_0^3} \\ &= Ze \frac{r^3}{R_0^3} \end{aligned} \quad (1.62)$$

y como  $p_m = Zer$  deducimos que

$$\alpha = 4\pi\epsilon_0 R^3 \quad (1.63)$$

### 1.3.2. Polarizabilidad Dipolar

$$\begin{aligned} M_0 &= -E_m q \frac{\ell}{2} \sin \theta - E_m q \frac{\ell}{2} \sin \theta + q E_R(t) \frac{\ell}{2} \cos \theta + q E_R(t) \frac{\ell}{2} \cos \theta \\ &= -E_m q \ell \sin \theta + E_R(t) q \ell \cos \theta \end{aligned} \quad (1.64)$$

si  $\theta \ll 1$

$$M_0 = -E_m p \theta + E_R(t) p - \tau_0 \dot{\theta} \quad (1.65)$$

donde  $\tau_0 \dot{\theta}$  es un termino disipativo que manifiesta cuando el dipolo emite radiación y pierde energía. Tenemos que  $I \ddot{\theta} = M_0$  donde  $I$  es el momento de inercia, por lo que podemos escribir a 1.64 como

$$\ddot{\theta} = -\frac{E_m p \theta + E_R \sin(\Omega t) p - \tau_0 \dot{\theta}}{I} \quad (1.66)$$

reescribiendo a 1.66 tenemos que

$$\ddot{\theta} + \frac{\tau_0}{I} \dot{\theta} + \frac{E_m p}{I} \theta = \frac{E_R p}{I} \sin(\Omega t) \quad (1.67)$$

la solución de 1.67 es

$$\begin{aligned} \theta(t) &= \frac{E_R p [\tau_0 \Omega \cos(\Omega t) + (I \Omega^2 - E_m p) \sin(\Omega t)]}{E_m^2 p^2 - 2 E_m I p \Omega^2 + \tau_0^2 \Omega^2 + I^2 \Omega^4} E_m p^2 \\ &+ \Omega^2 (\tau^2 - 2 E_m I p) + I^2 \Omega^4. \end{aligned} \quad (1.68)$$

### 1.3.3. Cristales Iónicos

La polarización es

$$p = e^* S \quad (1.69)$$

donde  $e^*$  es la carga iónica eléctrica. La ecuación que nos modela este sistema es la de oscilador armonico

$$\ddot{S} + \gamma \dot{S} = -\omega_0^2 S + \frac{e^*}{\mu} E_m \quad (1.70)$$

donde  $\mu$  es la masa reducida. La polarización es

$$P = n e^* S + \alpha \epsilon_0 n E_m \quad (1.71)$$

donde  $n$  es el número de electrones por unidad de volumen. Aplicando la transformada de Fourier a 1.70 tenemos

$$(\omega_0^2 - \omega^2 - i \omega \gamma) S(\omega) = \frac{e^*}{\mu} E_m(\omega) \quad (1.72)$$

lo que implica que

$$\begin{aligned} P(\omega) &= \frac{n(e^*)^2 E_m(\omega)}{\mu (\omega_0^2 - \omega^2 - i \omega \gamma)} + \alpha \epsilon_0 n E_m(\omega) \\ &= \left[ \frac{n(e^*)^2}{\mu (\omega_0^2 - \omega^2 - i \omega \gamma)} + \alpha \epsilon_0 n \right] E_m(\omega) \end{aligned} \quad (1.73)$$

y recordando que  $P(\omega) = \chi E_m(\omega) = (\epsilon(\omega) - \epsilon_0)E_m(\omega)$ , tenemos que

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{n(e^*)^2}{\mu(\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma)} + \alpha\epsilon_0 n. \quad (1.74)$$

Tenemos dos casos de interes, el es decir  $\epsilon(\omega)|_{\omega=0} = \epsilon_{est}$  y  $\epsilon(\omega)|_{\omega \rightarrow \infty} = \epsilon_\infty$

$$\epsilon_{est} = \epsilon_0(1 + n\alpha) + \frac{n(e^*)^2}{\mu\omega^2} \quad (1.75)$$

y

$$\epsilon_\infty = \epsilon_0(1 + n\alpha), \quad (1.76)$$

podemos escribir a 1.74 como

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_{est} - \epsilon_\infty)\omega_0^2}{\omega_0^2\omega^2 - i\gamma\omega} \quad (1.77)$$

pero como es 1.77 es un numero complejo, es decir  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)$  por lo tanto

$$\epsilon(\omega)_1 = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_{est} - \epsilon_\infty)\omega^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (1.78)$$

y

$$\epsilon(\omega)_2 = \frac{(\epsilon_{est} - \epsilon_\infty)\omega_0\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (1.79)$$

## 1.4. Polarización en función de la temperatura

### 1.4.1. Moléculas polares

De la mecánica estadística tenemos que si  $A$  es una cantidad física entonces

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_E A(E)e^{-E/k_B T}}{\sum_E e^{-E/k_B T}}. \quad (1.80)$$

Tenemos que la energía de una molécula polar la podemos modelar por

$$E(x, p) = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}I\omega^2 - \vec{p} \cdot \vec{E}_m \quad (1.81)$$

y tenemos que

$$\langle P_{0z} \rangle = \frac{\int dp^3 \int d\omega^3 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi P_{0z} e^{-[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}I\omega^2 - P_0 E_m \cos \theta]\beta}}{\int dp^3 \int d\omega^3 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}I\omega^2 - P_0 E_m \cos \theta]\beta}} \quad (1.82)$$

$$\langle P_{0z} \rangle = \frac{\int_0^\pi d\theta \sin \theta P_0 \cos \theta e^{P_0 E_m \cos \theta \beta}}{\int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{P_0 E_m \cos \theta \beta}} \quad (1.83)$$



Si definimos a  $Z = \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{P_0 E_m \cos \theta \beta}$ , podemos escribir a la relación 1.83 como

$$\langle P_{0z} \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial E_m}. \quad (1.84)$$

Al integrar  $Z$  obtenemos

$$Z = \frac{1}{E_m P_0 \beta} [e^{-E_m P_0 \beta} - e^{E_m P_0 \beta}] = \frac{2}{E_m P_0 \beta} \sinh(E_m P_0 \beta), \quad (1.85)$$

al efectuar 1.84 obtenemos

$$\langle P_{0z} \rangle = -\frac{K_B T}{E_m} + P_0 \coth\left(\frac{E_m P_0}{K_B T}\right) = P_0 \left[ \coth\left(\frac{E_m P_0}{K_B T}\right) - \frac{1}{\frac{E_m P_0}{K_B T}} \right] \quad (1.86)$$

la relación 1.86 se conoce como formula de Langevin. Desarrollando la a 1.86 en series para  $\frac{E_m P_0}{K_B T} \ll 1$ , obtenemos

$$\langle P_{0z} \rangle \approx \frac{1}{3} P_0 \frac{E_m P_0}{K_B T}, \quad (1.87)$$

como  $\langle P_{0z} \rangle$  es el momento dipolar efectivo promedio, entonces  $P = N \langle P_{0z} \rangle$  que tiene la dirección de  $E_m$ , en consecuencia 1.87 la podemos escribir como

$$\frac{1}{N} \vec{P} = \frac{P_0^2}{3K_B T} \vec{E}_m \quad (1.88)$$

de donde vemos que la polarizabilidad es

$$\alpha = \frac{P_0^2}{3K_B T} \quad (1.89)$$

## 1.5. Ferroelectricidad

Se vio en la sección 1.2.1 que el campo  $\vec{E}_m$  es el responsable de la polarización de las moléculas individuales. La relación entre  $\vec{E}_m$  y el campo eléctrico macroscópico  $\vec{E}$  se dio en la ecuación 1.57. En la mayoría de los casos la polarización es proporcional a  $\vec{E}$  de modo que  $\vec{E}_m$  se anula cuando  $\vec{E}$  tiende a cero, pero la ecuación 1.57 también es compatible con

$$\vec{E}_m = \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P}_0 \quad (1.90)$$

cuando  $\vec{E} = \vec{0}$ , es decir si existe una polarización  $\vec{P}_0$  esta creara en la molécula un campo eléctrico que tiende a polarizarla. Con toda seguridad, existe un campo polarizante; pero si este campo da origen a una polarización distinta de  $\vec{P}_0$  entonces la solución no es auto consistente. Por tanto si  $N$  es el número de moléculas por unidad de volumen,

$$\vec{P}_0 = N \alpha \vec{E}_m = \frac{N \alpha}{3\epsilon_0} \vec{P}_0 \quad (1.91)$$

que se satisface cuando  $\vec{P}_0 = \vec{0}$  o cuando

$$\frac{N\alpha}{3\epsilon_0} = 1. \quad (1.92)$$

Por consiguiente la condición para que se de una polarización permanente es 1.92.

El ejemplo más conocido de material ferroeléctrico es el titanato de bario,  $BaTiO_3$ , que presenta un momento dipolar espontáneo a temperaturas inferiores a  $408K$ . Otros materiales con un comportamiento ferroeléctrico son:  $KNbO_3 @ T_c = 708K$ ,  $PbTiO_3 @ T_c = 765K$ ,  $LiNbO_3 @ T_c = 1480k$ ,  $KH_2PO_4 @ 123K$ .

## 1.6. Polarones

$$\begin{aligned} P_x &= P_{x0} e^{-i(\omega t - qx)} \\ p_y &= P_{y0} e^{-i(\omega t - qx)} \end{aligned} \quad (1.93)$$

si pasamos al espacio de Fourier tenemos

$$\begin{aligned} \vec{P} &= \chi(\omega) \vec{E} \\ \vec{D} &= \epsilon(\omega) \vec{E} \\ \nabla \cdot \vec{D} &= \rho, \end{aligned} \quad (1.94)$$

con lo que podemos obtener

$$\nabla \cdot \vec{D} = \frac{\epsilon(\omega) \nabla \cdot \vec{P}}{\chi(\omega)} = \rho \quad (1.95)$$

si no hay cargas externas tenemos  $\rho = 0$ , es decir

$$\frac{\epsilon(\omega) \nabla \cdot \vec{P}}{\epsilon(\omega) - \epsilon_0} = 0. \quad (1.96)$$

Ahora escribimos las ecuaciones generales para ondas longitudinales y transversales

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{P}_L &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{P}_L &\neq 0 \\ \nabla \times \vec{P}_T &\neq 0 \\ \nabla \cdot \vec{P}_T &= 0 \end{aligned} \quad (1.97)$$

por lo que  $\vec{P} = \vec{P}_L + \vec{P}_T$ . Si  $\nabla \cdot \vec{P}_L \neq 0$  tenemos por la relación 1.96 lo siguiente

$$\epsilon(\omega_L) = 0 \quad (1.98)$$

ya que  $\nabla \cdot \vec{D}_L = 0$  y como  $\vec{D}_L = \epsilon(\omega_L) \vec{E}_L = \vec{0}$  y  $\vec{D}_L = \vec{P}_L + \epsilon_0 \vec{E}_L = \vec{0}$ , lo que implica

$$\vec{E}_L = -\frac{1}{\epsilon_0} \vec{P}_L. \quad (1.99)$$

Sabemos que  $\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$  y si proponemos  $\vec{E}(x) = E_x \vec{i} + E_y \vec{j} + E_z \vec{k}$ , por lo que tenemos

$$\nabla \times \vec{E} = \frac{\partial E_y}{\partial x} \vec{k} \quad (1.100)$$

y como  $E_y = \frac{1}{\chi} P_y$  tenemos  $E_y = \frac{P_y}{\epsilon(\omega) - \epsilon_0}$ , al sustituir esto en 1.100 tenemos

$$\nabla \times \vec{E} = \vec{k} i q \frac{P_y}{\epsilon(\omega) - \epsilon_0}. \quad (1.101)$$

Si proponemos  $\vec{B} = \vec{B}_0 e^{-i(\omega t - qx)}$  implica que

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -i\omega \vec{B}_0 e^{-i(\omega t - qx)} \quad (1.102)$$

e igualando 1.101 con 1.102, tenemos

$$\vec{k} \frac{P_{y0} i q}{\epsilon(\omega) - \epsilon_0} = i\omega \vec{k} B_0 = \vec{k} i\omega \mu_0 H_{0z} \quad (1.103)$$

de donde obtenemos

$$qP_{y0} - \mu_0 \omega [\epsilon(\omega) - \epsilon_0] H_{0z} = 0. \quad (1.104)$$

También sabemos que  $\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$  con  $\vec{J} = \vec{0}$ .

Proponemos  $\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} = \vec{k} H_z = \vec{k} H_{z0} e^{-i(\omega t - qx)}$ , por lo que

$$\nabla \times \vec{H} = -\vec{j} \partial_x H_z = -\vec{j} H_z i q \quad (1.105)$$

por otro lado

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} &= \frac{\partial \vec{D}_T}{\partial t} = \partial_t (\epsilon(\omega)) \vec{E}_T = \epsilon(\omega) \partial_t \frac{\vec{P}_T}{\chi(\omega)} \\ &= \frac{\epsilon(\omega)}{\chi(\omega)} (-i\omega) P_y \vec{j} \end{aligned} \quad (1.106)$$

igualando 1.105 con 1.106 tenemos

$$-H_{z0} = -\frac{\omega \epsilon(\omega)}{\epsilon(\omega) + \epsilon_0} \quad (1.107)$$

y finalmente

$$-(\epsilon(\omega) - \epsilon_0) H_{0z} q + \omega \epsilon(\omega) P_{y0} = 0. \quad (1.108)$$

Escribiendo en forma matricial a 1.104 y 1.108, esto es

$$\begin{pmatrix} q & -\omega \mu_0 \\ -\frac{\omega \epsilon(\omega)}{\epsilon(\omega) - \epsilon_0} & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{y0} \\ H_{z0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.109)$$

La solución trivial es cuando  $P_{y0} = H_{z0} = 0$ . Otra solución es que la matriz de lado izquierdo de 1.109 no tenga inversa esto es que su determinante sea cero, para así no tener la solución trivial.

$$\det \begin{pmatrix} q & -\omega\mu_0 \\ -\frac{\omega\epsilon(\omega)}{\epsilon(\omega)-\epsilon_0} & q \end{pmatrix} = q^2 - \omega^2\epsilon(\omega)\mu_0 = 0 \quad (1.110)$$

y de 1.110 tenemos la siguiente relación de dispersión

$$\omega^2 = \frac{q^2}{\epsilon(\omega)\mu_0}. \quad (1.111)$$

Recordando que la frecuencia de polarización iónica está dada por la relación 1.77, podemos escribir la 1.111 como

$$\omega^2 = \frac{q^2}{\epsilon_0 + \frac{\omega_0^2(\epsilon_{est}-\epsilon_\infty)}{\omega_0^2-\omega^2}}, \quad (1.112)$$

trabajando a 1.112 podemos llegar a

$$\omega^4\mu_0\epsilon_{infty} - \omega^2[\omega_0^2\mu_0\epsilon_{est} + q^2] + q^2\omega_0^2 = 0 \quad (1.113)$$

cuya solución para  $\omega^2(q)$  es

$$\omega^2(q) = \frac{\mu_0\omega_0^2\epsilon_{est} + q^2 \pm \sqrt{(\mu_0\omega_0^2\epsilon_{est} + q^2)^2 - 4\mu_0\epsilon_\infty q^2\omega_0^2}}{2\mu_0\epsilon_0}. \quad (1.114)$$

Tenemos dos casos de interés es decir cuando  $q \rightarrow \infty$  y  $q \rightarrow 0$ , para el primer caso tenemos

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow \infty} \omega^2(q) &= \frac{q^2}{\mu_0\epsilon_\infty} \\ \omega(q) &= \frac{q}{\sqrt{\mu_0\epsilon_\infty}} \end{aligned} \quad (1.115)$$

y para el segundo caso

$$\begin{aligned} \omega^2(q=0) &= \frac{\omega_0^2\epsilon_{est}}{\epsilon_\infty} \\ \omega(0) &= \omega_0 \sqrt{\frac{\epsilon_{est}}{\epsilon_\infty}} \end{aligned} \quad (1.116)$$

## 1.7. Función Dieléctrica

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{D} &= \rho \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{H} &= \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.117)$$

$$\begin{aligned}
\vec{D}(\omega) &= \epsilon_0 \epsilon(\omega) \vec{E}(\omega) \\
\vec{D}(t) &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a^n \omega^n \vec{E}(\omega) d\omega e^{-i\omega t} \\
&= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a^n (-i)^n \frac{\partial^n e^{-i\omega t}}{\partial t^n} \vec{E}(\omega) d\omega \\
&= \epsilon_0 \sum_{n=0}^{\infty} a^n \left(i \frac{\partial}{\partial t}\right)^n \vec{E}(t)
\end{aligned} \tag{1.118}$$

por 1.118 tenemos

$$\epsilon(\omega) \rightarrow \epsilon\left(i \frac{\partial}{\partial t}\right), \tag{1.119}$$

por lo que ahora podemos escribir las relaciones de Maxwell en el espacio de las frecuencias como

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \vec{D}(\omega) &= \rho(\omega) \\
\nabla \times \vec{E}(\omega) &= i\omega \vec{B}(\omega) \\
\nabla \cdot \vec{B}(\omega) &= 0 \\
\nabla \times \vec{H}(\omega) &= \vec{J}(\omega) - i\omega \vec{D}(\omega)
\end{aligned} \tag{1.120}$$

de la última ecuación de 1.120 tenemos

$$\begin{aligned}
\nabla \times \vec{H}(\omega) &= \vec{J}(\omega) - i\omega \epsilon(\omega) \vec{E}(\omega) \\
&= [\sigma - i\omega \epsilon(\omega)] \vec{E}(\omega) \\
&= \tilde{\sigma} \vec{E}(\omega)
\end{aligned} \tag{1.121}$$

donde  $\tilde{\sigma}$  es la conductividad generalizada que contiene el efecto del dieléctrico. De 1.121 podemos trabajar lo siguiente

$$\begin{aligned}
\nabla \times \vec{H}(\omega) &= [\sigma - i\omega \epsilon(\omega)] \vec{E}(\omega) \\
&= -i\omega \left[ \frac{\sigma}{-i\omega} + \epsilon_0 \epsilon(\omega) \right] \vec{E}(\omega) = -i\omega \epsilon_0 \tilde{\epsilon}(\omega)
\end{aligned} \tag{1.122}$$

y al comparar 1.122 con 1.121, obtenemos que

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = \frac{i}{\omega} (\sigma - i\omega \epsilon(\omega)) \tag{1.123}$$

## 1.8. Introducción a la energía libre de Helmholtz

$$\begin{aligned}
S &\equiv S(u, v) \\
du &= TdS - PdV \\
dS &= \frac{1}{T}du + \frac{P}{T}dV \\
F &= u - TS \equiv F(v, T) \\
dF &= -SdT - PdV \\
-S &= \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V \\
-P &= \frac{\partial F}{\partial V} \\
u &= u_0 - PE \\
F &= -PE + u_0 - TS \equiv F(P; V, T).
\end{aligned} \tag{1.124}$$

$$\begin{aligned}
\vec{P} &= \chi \vec{E} \\
\vec{D} &= \epsilon \vec{E} \\
u_E &= \frac{1}{2} \int_V \vec{E} \cdot \vec{D} d^3x \\
u_E &= \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{D} = \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \epsilon \vec{E} = \frac{1}{2} E^2 \\
du_E &= \epsilon \vec{E} \cdot d\vec{E} = \frac{\epsilon \vec{E} \cdot d\vec{P}}{\chi} \\
u_E &= \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{D} = \frac{1}{2} \vec{E} \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) = \frac{\epsilon_0}{2} \vec{E} \cdot \vec{E} + \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{P} \\
&= u_{vacio} + \frac{1}{2} \vec{E} \chi \cdot \vec{E} \\
u_p &= \frac{1}{2} \chi E^2 \\
du_p &= \vec{E} \chi \cdot d\vec{E} = \vec{E} \cdot d\vec{P}
\end{aligned} \tag{1.125}$$

La energía interna total es

$$du = \delta Q - PdV + \vec{E} \cdot d\vec{P} \tag{1.126}$$

## 1.9. Procesos reversibles

$$du = TdS + \sum_{i=1}^n X_i dY_i \tag{1.127}$$

$$u \equiv u(S, Y_1, \dots, Y_n) \tag{1.128}$$

$$\begin{aligned}
\lambda u &= u(\lambda S, \lambda Y_1, \dots, \lambda Y_n) \\
\frac{\partial \lambda u}{\partial \lambda} &= u = \frac{\partial u}{\partial \lambda S} S + \sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial (\lambda Y_i)} \frac{\partial (\lambda Y_i)}{\partial \lambda} \\
&= \frac{\partial u}{\partial (\lambda S)} S + \sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial (\lambda Y_i)} Y_i.
\end{aligned} \tag{1.129}$$

Para  $\lambda = 1$

$$\begin{aligned}
u &= \frac{\partial u}{\partial S} S + \sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial Y_i} Y_i \\
&= TS + \sum_{i=1}^n X_i Y_i \\
du &= TdS + \sum_{i=1}^n X_i Y_i + SdT + \sum_{i=1}^n Y_i dX_i
\end{aligned} \tag{1.130}$$

y como  $du = TdS + \sum_{i=1}^n X_i Y_i$ , tenemos la ecuación de Gibbs-Duhem

$$SdT + \sum_i Y_i dX_i = 0. \tag{1.131}$$

Recordemos que el potencial de Helmholtz es

$$F(T, V, P) \equiv u - TS = TS + \sum_{i=1}^n X_i Y_i - TS = \sum_{i=1}^n X_i Y_i = -PV + EP \tag{1.132}$$

y considerando volumen constante, tenemos a  $F$  en forma diferencial como

$$dF = -SdT + EdP \tag{1.133}$$

$$\int_A^B \frac{\delta Q}{T} \leq S(B) - S(A), \tag{1.134}$$

si  $T = \text{constante}$

$$dF = EdP \tag{1.135}$$

$$\frac{1}{T}[Q(A) - Q(B)] \leq \frac{1}{T}[u(A) - u(B) + \frac{1}{T}W_{A \rightarrow B}] \leq S(B) - S(A) \tag{1.136}$$

$$[u(A) - TS(A)] - [u(B) - TS(B)] \geq -W_{A \rightarrow B} \tag{1.137}$$

$$-W_{A \rightarrow B} \leq [-F(B) + F(A)] = \Delta F \tag{1.138}$$

$$W_{A \rightarrow B} \geq \Delta F \tag{1.139}$$

si  $W_{A \rightarrow B} = 0$  y reversible

$$\Delta F = 0 \tag{1.140}$$

y

$$F(A) = F(B) \tag{1.141}$$

## 1.10. Teoría de Landau de Transiciones de Fase

Energía libre de Landau tiene la forma

$$F(P, T, E) = PE + g_0 + \frac{1}{2}g_2P^2 + \frac{1}{4}g_4P^4 + \dots \quad (1.142)$$

con  $g_n \equiv g_n(T)$ . En el equilibrio térmico el valor de  $P$  esta dado por el mínimo de  $F$  y en ese valor se define la energía libre de Helmholtz.

$$\frac{\partial F}{\partial P} = 0 = E + g_2P + g_4P^3 + g_6P^5 + \dots \quad (1.143)$$

Para obtener un estado ferroeléctrico

$$g_2 = \gamma(T - T_0) \quad (1.144)$$

### 1.10.1. Primer Orden

$$\gamma(T - T_0)P_s + g_4P_s^3 = 0 \quad (1.145)$$

lo que implica

$$P_s = 0 \quad (1.146)$$

$$P_s^2 = \left(\frac{\gamma}{g_4}\right)(T_0 - T), \quad (1.147)$$

para  $T \geq T_0$   $P_0 = 0$  es la unica raiz real. Para  $T < T_0$  tenemos

$$|P_s| = \left(\frac{\gamma}{g_4}\right)^{1/2} (T - T_0)^{1/2}. \quad (1.148)$$

### 1.10.2. Segundo orden

$g_4 < 0$  tenemos que dejar a  $g_6$  para evitar  $F \rightarrow -\infty$

$$\gamma(T - T_0)P_s - |\gamma_4|P_s^3 + g_6P_s^5 = 0 \quad (1.149)$$

lo que implica

$$P_s = 0 \quad (1.150)$$

o

$$\gamma(T - T_0) - |g_4|P_s^2 + g_6P_s^4 = 0 \quad (1.151)$$



## 1.11 Polarones: Modos transversales y longitudinales de vibración 27

### 1.11. Polarones: Modos transversales y longitudinales de vibración

Imaginemos una onda electromagnética plana y monocromática viajando en una dirección  $x$  dentro de un material bien loco. El campo eléctrico estará descrito por:

$$E_x = E_{x0}e^{-i(\omega t - qx)} \quad (1.152)$$

y el magnético:

$$\vec{B} = \vec{B}e^{-i(\omega t - qx)} \quad (1.153)$$

El campo eléctrico ejerce una fuerza sobre los dipolos del material dieléctrico y los pone a oscilar. Los dipolos oscilan no solo transversalmente a la dirección de propagación de la onda, también longitudinalmente. Estas oscilaciones quedan bien descritas por el vector de polarización  $P = (P_x, P_y)$  :

$$P_x = P_{x0}e^{-i(\omega t - qx)} : \text{Onda longitudinal} \quad (1.154)$$

$$P_y = P_{y0}e^{-i(\omega t - qx)} : \text{Onda transversal} \quad (1.155)$$

Utilizamos ahora los siguientes resultados:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho$$

dónde  $\rho$  es densidad de posible carga externa

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (1.156)$$

$$\vec{P} = \chi(\omega) \vec{E} \quad (1.157)$$

$$\vec{D} = \epsilon(\omega) \vec{E} \quad (1.158)$$

donde

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \chi(\omega) \quad (1.159)$$

$$\rightarrow \vec{D} = \epsilon(\omega) \vec{E} = \epsilon(\omega) \frac{\vec{P}}{\chi(\omega)}$$

$$\rightarrow \nabla \cdot \vec{D} = \epsilon(\omega) \frac{\nabla \cdot \vec{P}}{\epsilon(\omega) - \epsilon_0} = \rho$$

Si no hay carga externa entonces  $\rho = 0 \Rightarrow \nabla \cdot \vec{P} = 0$

$$\rightarrow \nabla \cdot \vec{D} = \epsilon(\omega) \frac{\nabla \cdot \vec{P}}{\epsilon(\omega) - \epsilon_0} = 0 \quad (1.160)$$

Por otro lado, para las ondas longitudinales se cumple.

$$\nabla \times \vec{P}_L = 0, \nabla \cdot \vec{P}_L \neq 0$$

y para las transversales

$$\nabla \times \vec{P}_T \neq 0, \nabla \cdot \vec{P}_T = 0$$

Si ponemos la condición  $\nabla \cdot \vec{P}_L \neq 0$  Entonces para satisfacer (1.160) en la componente longitudinal:

$$\rightarrow \nabla \cdot \vec{D}_L = \epsilon(w) \frac{\nabla \cdot \vec{P}_L}{\epsilon(w) - \epsilon_0} = 0$$

debe cumplirse:

$$\epsilon(w) = 0$$

para alguna frecuencia  $w \equiv w_L$  Es decir, la unica frecuencia para la cual es posible que exista un modo longitudinal es aquella que hace que  $\epsilon$  sea cero.

Entonces usando (1.157), y (1.159) se tiene:

$$\vec{E}_L = -\frac{1}{\epsilon_0} \vec{P}_L$$

Por otro lado según Maxwell:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.161)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.162)$$

y usando las ecuaciones (1.157),(1.152),(1.153):

$$\nabla \times \vec{E} = \vec{i}(\partial_y E_z - \partial_z E_y) + \vec{j}(\partial_x E_z - \partial_z E_x) + \vec{k}(\partial_x E_y - \partial_y E_x) \quad (1.163)$$

$$= \vec{k} \left( \frac{1}{\epsilon(w) - \epsilon_0} \partial_x P_y e^{-i(\omega t - qx)} \right) = -\frac{\partial}{\partial t} (\vec{i} B_x + \vec{j} B_y + \vec{k} B_z) \quad (1.164)$$

lo anterior porque E es una onda plana monocromatica que viaja en dirección de  $x$  y por lo tanto solo depende de  $x$  y las componentes del vector son perpendiculares a esta dirección.

Además se concluye que:

$$B_x = B_y = 0$$

Recordando que  $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$  se tiene:

$$\frac{iq}{\epsilon(w) - \epsilon_0} P_y e^{-i(\omega t - qx)} = i\omega \mu_0 H_z e^{i(\omega t - qx)} \quad (1.165)$$

$$qP_{y0} - \mu w(\epsilon(w) - \epsilon_0)H_z = 0 \quad (1.166)$$

De la ecuacion de maxwell:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\text{partial}t}$$

se llega a otra ecuacion para  $\epsilon(w)$  :

$$-w \frac{\epsilon(w)}{\epsilon(w) - \epsilon_0} P_y + qH_z = 0 \quad (1.167)$$

De (1.166) y (1.167):

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} q & -\mu_0 w(\epsilon(w) - \epsilon_0) \\ -w \frac{\epsilon(w)}{\epsilon(w) - \epsilon_0} & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_y \\ P_z \end{pmatrix} = 0$$

Para evitar que  $P_y$  y  $P_z$  sean cero la matriz de la izquierda debe ser cero y para ello su determinante debe ser 0.

$$\det M = 0 = q^2 - \mu_0 w^2 \epsilon(w) = 0$$

Obteniendose así la relación de dispersión de los polaritones:

$$\Rightarrow w^2 = \frac{q^2}{\mu_0 \epsilon(w)} \quad (1.168)$$

## 1.12. Caso Iónico

Introducimos ahora, la ecuación  $\epsilon(w)$  para el caso iónico en en la relación de dispersión de los polaritones.

$$\epsilon(w) = \epsilon_\infty + \frac{w_0^2(\epsilon_{ST} - \epsilon_{infly})}{w_0^2 - w^2 - i\gamma w}$$

$$\Rightarrow w^2 = \frac{q^2}{\mu_0 [\epsilon_\infty + \frac{w_0^2(\epsilon_{ST} - \epsilon_\infty)}{w_0^2 - w^2 - i\gamma w}]}$$

Supongamos que  $\gamma = 0$

$$\Rightarrow w^2 = \frac{q^2(w_0^2 - w^2)}{\mu_0 [\epsilon_\infty(w_0^2 - w^2) + w_0^2(\epsilon_{ST} - \epsilon_\infty)]}$$

$$\Rightarrow w^4 \mu_0 \epsilon_\infty - w^2(w_0^2 \mu_0 \epsilon_{ST} + q^2) - q^2 w_0^2 = 0$$

Cuya solución es:

$$w^2 = \frac{w_0^2 \mu_0 \epsilon_{ST} + q^2 \pm \sqrt{(w_0^2 \mu_0 \epsilon_{ST} + q^2)^2 + 4\mu_0 \epsilon_\infty q^2 w_0^2}}{2\mu_0 \epsilon_\infty} \quad (1.169)$$

En donde  $w_0$  es la frecuencia natural de los fonones.

Diferenciamos ahora dos ecuaciones para  $w(q)$ , según escojamos el signo positivo (rama superior) o negativo (rama inferior) de la raíz cuadrada:

Rama Superior Signo Positivo de la raíz.

Pensemos en radiación electromagnética con longitudes de onda muy cortas ( $\lambda \rightarrow 0$ ). O sea, que varíen poco espacialmente.

Para este tipo de ondas se hace la aproximación  $q \rightarrow \infty$  ( $q = \frac{1}{\lambda}$ ) en la ecuación (1.169)

Haciendo una aproximación muy burda tenemos:

$$\Rightarrow \lim_{q \rightarrow \infty} w^2(q) \approx \frac{q^2 + \sqrt{q^4}}{2\mu_0\epsilon_\infty}$$

ya que solo consideramos el término  $q^4$  dentro de la raíz

$$w(q) = \frac{q}{\sqrt{\mu_0\epsilon_\infty}} \quad (1.170)$$

Es decir para longitudes de onda muy cortas, la relación entre frecuencia  $w$  y  $\lambda$  (relación de dispersión) es lineal.

Ahora, cuando  $\lambda \rightarrow \infty \Rightarrow q \rightarrow 0$ , dentro de la raíz cuadrada de la ecuación (1.169) solo sobrevive el término independiente de  $q$ :

$$w^2(0) = \frac{\mu_0 w_0^2 \epsilon_{infty} + \sqrt{(\mu_0 w_0^2 \epsilon_{ST})^2}}{2\mu_0 \epsilon_{infty}}$$

$$\Rightarrow w^2(0) = \frac{w_0^2 \epsilon_{ST}}{\epsilon_{infty}}$$

Rama inferior Signo negativo de la raíz.

Considerando el caso límite  $q \rightarrow \infty$  Para evitar que  $w(q) = 0$  al solo considerar el término  $q^4$  dentro de la raíz en (1.169) hacemos una aproximación más fina. Entonces desarrollando en series de potencias resulta:

$$\lim_{q \rightarrow \infty} w(q) = w_0 \sqrt{1 - \frac{\epsilon_{ST}}{2\epsilon_{infty}}}$$

Considerando el caso  $q = 0$  :

$$w^2(0) = \frac{\mu_0 w_0^2 \epsilon_{ST} - \sqrt{(\mu_0 w_0^2 \epsilon_{ST})^2}}{2\mu_0 \epsilon_{infty}} = 0$$

Podemos ahora intuir la forma de las gráficas para las dos ramas.

## Capítulo 2

# Respuesta al Campo Magnético

### 2.1. Las corrientes de magnetización $\mathbf{j}_M$ y $\mathbf{J}_M$

Empecemos con la ley de Biot - Savart

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (2.1)$$

En cristiano, la ecuación anterior quiere decir que para todo campo magnético  $\mathbf{B}$  siempre existe una posible configuración de densidad de corriente  $\mathbf{J}$  que lo origina. Es de notar que para el campo eléctrico existe una ecuación parecida:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\epsilon_0} \int_{v'} \frac{\rho(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (2.2)$$

En dónde la densidad de carga eléctrica  $\rho$  ha sustituido a la densidad de corriente  $\mathbf{J}$ . Ahora expresemos la ley de Biot Savart de una forma diferente:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \nabla_{\mathbf{r}} \times \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} = \nabla_{\mathbf{r}} \times \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.3)$$

Para obtener la ecuación 2.3 a partir de 2.2 usamos los siguientes resultados matemáticos:

$$\nabla_{\mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (2.4)$$

$$\nabla \times (\varphi \mathbf{F}) = \nabla \varphi \times \mathbf{F} + \varphi \nabla \times \mathbf{F} \quad (2.5)$$

Si tomamos  $\varphi = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$  entonces combinando 2.4 y 2.5 obtenemos

$$\nabla_{\mathbf{r}} \times \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathbf{J}(\mathbf{r}') \right) = \left( \nabla_{\mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \times \mathbf{J}(\mathbf{r}') + \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{J}(\mathbf{r}')$$

pero  $\nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{J}(\mathbf{r}') = 0$  puesto que las derivadas se hacen respecto a las coordenadas  $x, y, z$  y  $\mathbf{J}(\mathbf{r}')$  depende de las coordenadas  $x', y', z'$ . Por lo tanto

$$\nabla_{\mathbf{r}} \times \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathbf{J}(\mathbf{r}') \right) = \left( \nabla_{\mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \times \mathbf{J}(\mathbf{r}') = \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}$$

De regreso a la ecuación 2.3 identificamos a la parte derecha de la igualdad como el potencial vectorial  $\mathbf{A}$  porque la definición de  $\mathbf{A}$  es

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

Por lo tanto

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.7)$$

También ésta ecuación tiene su análoga en el caso eléctrico

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{v'} \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.8)$$

Ahora, simplifiquemos la expresión para  $\mathbf{A}$  llevando a cabo la siguiente aproximación  $\mathbf{r} \gg \mathbf{r}'$ . Lo que equivale a decir que vamos a evaluar el potencial  $\mathbf{A}$  muy lejos del material de volumen  $V'$ . Entonces al usar el teorema de Taylor:  $f(\mathbf{r}') = f(\mathbf{0}) + \nabla_{\mathbf{r}'} f(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{r}' + \dots$  Por lo tanto

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{|\mathbf{r}|} + \nabla_{\mathbf{r}'} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Big|_{\mathbf{r}'=0} \cdot \mathbf{r}' + \dots = \frac{1}{|\mathbf{r}|} + \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \Big|_{\mathbf{r}'=0} \cdot \mathbf{r}' + \dots = \frac{1}{|\mathbf{r}|} \left( 1 + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}|^2} \right)$$

en dónde en el segundo paso nos hemos auxiliado de la ecuación 2.4 y además hemos supuesto que el volumen  $V'$  se haya localizado en el origen. Entonces la expresión para  $\mathbf{A}$  queda como la suma de dos integrales. La primera incluye las corrientes externas al material y la segunda corresponde propiamente al material magnético:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi|\mathbf{r}|} \int_{v'} \mathbf{J}(\mathbf{r}') + \frac{\mu_0}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \int_{v'} \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' \mathbf{J}(\mathbf{r}') \quad (2.9)$$

Desarrollemos el segundo integrando

$$(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}') \mathbf{J}(\mathbf{r}') = x_i x_i \mathbf{J}(\mathbf{r}')$$

dónde hemos usado la notación de Einstein:  $\sum_{i=1}^3 \equiv x_i x_i$  entonces

$$\begin{aligned} \int_{v'} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}') \mathbf{J}(\mathbf{r}') &= \int_{v'} x_i x_i \mathbf{J}(\mathbf{r}') = x_i \int_{v'} x'_i \mathbf{J}(\mathbf{r}') = x_i \int_{v'} x'_i (J_1(\mathbf{r}'), J_2(\mathbf{r}'), J_3(\mathbf{r}')) \\ &= x_i \int_{v'} x'_i (J'_1, J'_2, J'_3) \end{aligned} \quad (2.10)$$

dónde  $J'_1 \equiv J_1(\mathbf{r}')$ . Resolvamos una de las tres integrales de 2.10:

$$x_i \int_{v'} x'_i J'_i = x_i \int_{v'} x'_i \mathbf{J}' \cdot \frac{\partial \mathbf{r}'}{\partial x'_j} = x_i \int_{v'} (\mathbf{J}' \cdot \nabla x'_j) x'_i =$$

$$\begin{aligned}
& \langle \text{porque } \mathbf{J} \cdot \nabla x_j = \left( \frac{\partial x_j}{\partial x_1}, \frac{\partial x_j}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial x_j}{\partial x_j}, \dots \right) \cdot (J_1, J_2, \dots, J_j, \dots) = \\
& \quad (0, 0, \dots, 1, \dots) \cdot (J_1, J_2, \dots, J_j, \dots) = J_j \rangle \\
& = x_i \left( \int_{v'} \nabla \cdot (\mathbf{J}' x'_i x'_j) - \int_{v'} (\nabla \cdot \mathbf{J}') x'_i x'_j - \int_{v'} \mathbf{J}' \cdot (\nabla x'_i) x'_i x'_j \right) = \\
& = x_i \left( \oint x'_i x'_j \mathbf{J}' \cdot \mathbf{n} - \int_{v'} \nabla \cdot \mathbf{J}' x'_i x'_j - \int_{v'} \mathbf{J}' \cdot (\nabla x'_i) x'_i x'_j \right) \quad (2.11)
\end{aligned}$$

La primera integral es aproximadamente el flujo de corriente que atraviesa un volúmen que contenga a todo el material, es decir, que contenga a  $V'$ . Por lo tanto, podemos escoger un volúmen de integración suficientemente grande para evitar todo tipo de corriente y hacer que el flujo sea cero. Así pues:

$$\oint x'_i x'_j \mathbf{J}' \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.12)$$

Por otro lado, si la densidad de carga  $\rho$  es independiente del tiempo, la ecuación de continuidad  $\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$  nos permite deshacernos de la segunda integral:

$$\int_{v'} \nabla \cdot \mathbf{J}' x'_i x'_j = 0 \quad (2.13)$$

Entonces:

$$x_i \int_{v'} x'_i J'_j = -x_i \int_{v'} x'_j J'_i \quad (2.14)$$

A partir de 2.14 se obtiene

$$x_i \int_{v'} x'_i J'_j = \frac{1}{2} x_i \int_{v'} (x'_i J'_j - x'_j J'_i) = \frac{1}{2} x_i \int_{v'} (\delta_{jn} \delta_{mi} - \delta_{jm} \delta_{ni}) x'_m J'_n =$$

en dónde en el último paso hemos empleado la definición

$$\begin{aligned}
\delta_{im} x'_m &= \sum_{m=1}^3 \delta_{im} x'_m = x'_i \\
&= \frac{1}{2} x_i \int_{v'} \epsilon_{kjm} \epsilon_{kni} x'_m J'_n = \frac{1}{2} \int_{v'} \epsilon_{kjn} \epsilon_{kmi} x_i x'_m J'_n = \\
&= \frac{1}{2} \int_{v'} [\mathbf{r}' \times \mathbf{r}]_k \epsilon_{kjn} J'_n = \frac{1}{2} \int_{v'} [\mathbf{r}' \times \mathbf{r}]_k \epsilon_{jnk} J'_n = \\
&= \frac{1}{2} \int_{v'} (\mathbf{J} \times [\mathbf{r}' \times \mathbf{r}])_j = \frac{1}{2} \int_{v'} (\mathbf{r}' \times \mathbf{J}(\mathbf{r}') \times \mathbf{r})_j
\end{aligned}$$

En los pasos anteriores hemos usado las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned}
\delta_{jn} \delta_{mi} - \delta_{jm} \delta_{ni} &= \epsilon_{kjm} \epsilon_{kni} \\
(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_i &= \sum \epsilon_{ikl} \mathbf{A}_k \mathbf{B}_l \\
\epsilon_{kjn} &= \epsilon_{nkj} = \epsilon_{jnk}
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$x_i \int_{v'} x'_j J'_j = \frac{1}{2} \int_{v'} [(\mathbf{r}' \times \mathbf{J}(\mathbf{r}')) \times \mathbf{r}]_j \quad (2.15)$$

Al sustituir la ecuación 2.15 en la ecuación 2.10 y el resultado a su vez en 2.9 obtenemos:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r} \int_{v'} \mathbf{J}(\mathbf{r}') + \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[ \frac{1}{2} \int_{v'} \mathbf{r}' \times \mathbf{J}(\mathbf{r}') \right] \times \mathbf{r} \quad (2.16)$$

Definimos

$$m \equiv \frac{1}{2} \int_{v'} \mathbf{r}' \times \mathbf{J}(\mathbf{r}') \quad (2.17)$$

A  $m$  se le conoce como momento dipolar magnético. Entonces, el potencial vectorial debido puramente al material magnético es

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \mathbf{m} \times \mathbf{r}$$

Un caso más general es cuando el volumen del material no se haya localizado en el origen, sino en un  $\mathbf{r}'$ , entonces

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{m} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (2.18)$$

En la ecuación anterior  $\mathbf{m}$  es el momento magnético de un material localizado en  $\mathbf{r}'$ . Para una descripción más precisa del material, supondremos ahora que éste se haya formado por el conjunto de muchos pedacitos de material con volumen  $\Delta v_i$ . Entonces, cada uno de estos volumencitos tiene su propio momento magnético  $\mathbf{m}_i$ . Realicemos ahora otra de esas abstracciones matemáticas odiosas que sin embargo terminan por facilitarnos la vida y ser felices: supongamos que los volumencitos son infinitamente pequeños y entonces definimos la cantidad  $M$  como

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}') = \lim_{\Delta v_i \rightarrow 0} \frac{\mathbf{m}_i(\mathbf{r}')}{\Delta v_i}$$

Entonces

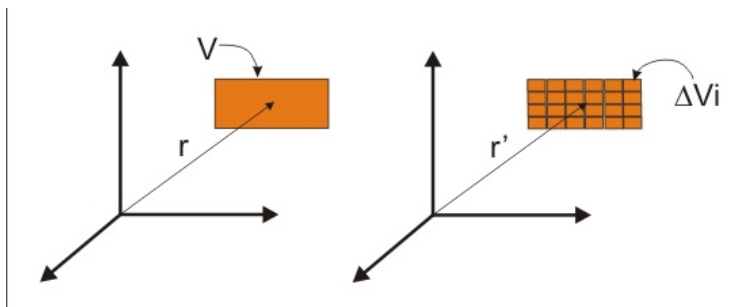


Figura 2.1:

$$\Delta \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \mathbf{M}(\mathbf{r}') \Delta v \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}$$



Así que el potencial vectorial total del volumen  $V$  está dado por

$$\begin{aligned}\mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i=0}^n \mathbf{M}(\mathbf{r}') \Delta v_i \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \mathbf{M}(\mathbf{r}') \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} = \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \mathbf{M}(\mathbf{r}') \times \nabla \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\end{aligned}$$

En el paso anterior se empleó la ecuación 2.3. Ahora usamos el siguiente resultado matemático:

$$\mathbf{A} \times \nabla \Psi = \Psi \nabla \times \mathbf{A} - \nabla \times (\Psi \mathbf{A})$$

para obtener:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \nabla_{\mathbf{r}'} \times \mathbf{M}(\mathbf{r}') - \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \nabla_{\mathbf{r}'} \times \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.19)$$

o lo que es lo mismo:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{v'} \frac{\nabla_{\mathbf{r}'} \times \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_{s'} \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \times \mathbf{n}' \quad (2.20)$$

Comparamos las ecuaciones 2.20 y 2.8 para definir dos corrientes de magnetización:

$$\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{J}_{\mathbf{M}}(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{n}} \equiv \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

observese que  $\mathbf{j}$  es efectivamente una corriente superficial, pues es normal al vector de superficie  $\hat{\mathbf{n}}$ .

## 2.2. El campo $\mathbf{H}$ y condiciones de continuidad.

Según la ley de Ampere en el caso de campos eléctricos estáticos

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}_{efectiva} \quad (2.23)$$

Pues resulta que la ley de Ampere se sigue cumpliendo dentro de un material magnético si la  $\mathbf{J}_{efectiva}$  es la suma de las  $\mathbf{J}$  verdaderas, más las  $\mathbf{J}_{\mathbf{M}}$  de magnetización. Entonces

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{J} + \mathbf{J}_{\mathbf{M}}) = \mu_0 (\mathbf{J} + \nabla \times \mathbf{M}) \quad (2.24)$$

Entonces

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M} \right) = \mathbf{J}$$

Definimos la cantidad  $\mathbf{H}$  como

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M} \quad (2.25)$$

Ahora veamos lo que ocurre en la frontera de un material magnético. El primer resultado se basa en la inexistencia de monopolos magnéticos dentro del material, al menos. Para ello

consideramos un volúmen diferencial que encierre parte del material magnético y parte del exterior. Además, tomemos un volúmen tal que la distancia que une las caras externa e interna sea 0, es decir,  $l \rightarrow 0$  en la figura. Entonces

$$\int_v \nabla \cdot \mathbf{B} = \oint_a \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{B}_{c1} \cdot \hat{\mathbf{n}}_1 A_c + \mathbf{B}_{c2} \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 A_c + \mathbf{B}_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_3 A_f = 0$$

Pero como  $l \rightarrow 0$  entonces  $A_f = 0$ . Entonces

$$\mathbf{B}_{c1} \cdot \hat{\mathbf{n}}_1 = \mathbf{B}_{c1} \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 \quad (2.26)$$

Es decir, la componente del campo magnético que es normal a la superficie es continua al pasar del material al exterior. El segundo resultado se basa en la ley de Ampere en ausencia de campos eléctricos cambiantes en el tiempo:  $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}$ . Entonces hagamos la siguiente integral sobre la superficie encerrada  $s$  por una trayectoria que pase dentro del material magnético y por fuera de él. Suponemos que es tan pequeña que en cada tramo el campo es tomado como constante. Además suponemos que el trayecto  $h$  que une el camino exterior con el interior es tan pequeño que se toma como 0.

$$\int_s (\nabla \times \mathbf{H}) \cdot \hat{\mathbf{n}}' = \int_s \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}'$$

Entonces

$$\begin{aligned} \int_s \nabla \times \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{n}}' &= \oint_c \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{l}} = \mathbf{H}_2 \cdot \hat{\mathbf{t}}l + \mathbf{H}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 \frac{h}{2} + \mathbf{H}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 \frac{h}{2} - \mathbf{H}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}l - \mathbf{H}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 \frac{h}{2} - \mathbf{H}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 \frac{h}{2} = \\ &= (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) \cdot \hat{\mathbf{t}}l = \int_s \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}' \cong \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}'lh + \mathbf{j} \cdot \hat{\mathbf{n}}'l \end{aligned}$$

Ahora, si tomamos en cuenta que  $h \rightarrow 0$ , entonces, no pasa ninguna corriente volumétrica por el área  $s$  pero si podría pasar una corriente superficial  $\mathbf{j}$  (ver figura). Entonces

$$(\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) \cdot \hat{\mathbf{t}} = \mathbf{j} \cdot \hat{\mathbf{n}}' \quad (2.27)$$

La ecuación anterior quiere decir que si existen corrientes en la superficie del material entonces la componente de  $\mathbf{H}$  paralela a la superficie no es continua al pasar del material al exterior.

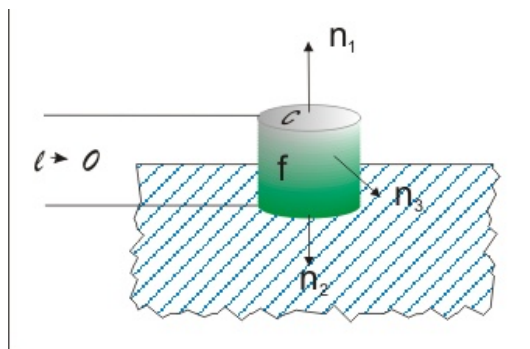


Figura 2.2:

### 2.3. Energía de un dipolo en un campo magnético

Un dipolo magnético puede verse como simplemente un anillo de corriente. Por lo tanto produce su propio campo magnético. Entonces, si colocamos este anillo en un campo magnético externo, ambos campos interactúan y ejercen una fuerza que obliga al dipolo a girar. Se  $\mathbf{B}$  un campo magnético uniforme y pongamos un dipolo dentro de este campo. la fuerza ejercida por el campo  $\mathbf{B}$  sobre una carga en movimiento se expresa:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

dónde  $\mathbf{v}$  es la velocidad de la carga. Por tanto:

$$\mathbf{J} = qn\mathbf{v}$$

Entonces la fuerza ejercida sobre un pedazo del anillo de corriente es:

$$d\mathbf{F} = \mathbf{J} \times \mathbf{B}dv$$

Entonces

$$\mathbf{F} = \int_v \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (2.28)$$

De la figura vemos que  $F_1$  se cancela con  $F_2$  y  $F_3$  con  $F_4$  pero éste último par de fuerzas tienen diferente línea de acción y por lo tanto provocan una torca sobre el anillo

$$\boldsymbol{\tau} = \int_v \mathbf{r} \times d\mathbf{F} = \int_v \mathbf{r} \times (\mathbf{J} \times \mathbf{B}) \quad (2.29)$$

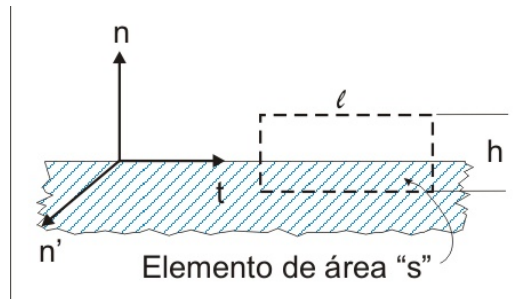


Figura 2.3:

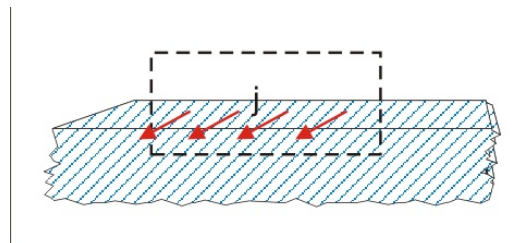


Figura 2.4:

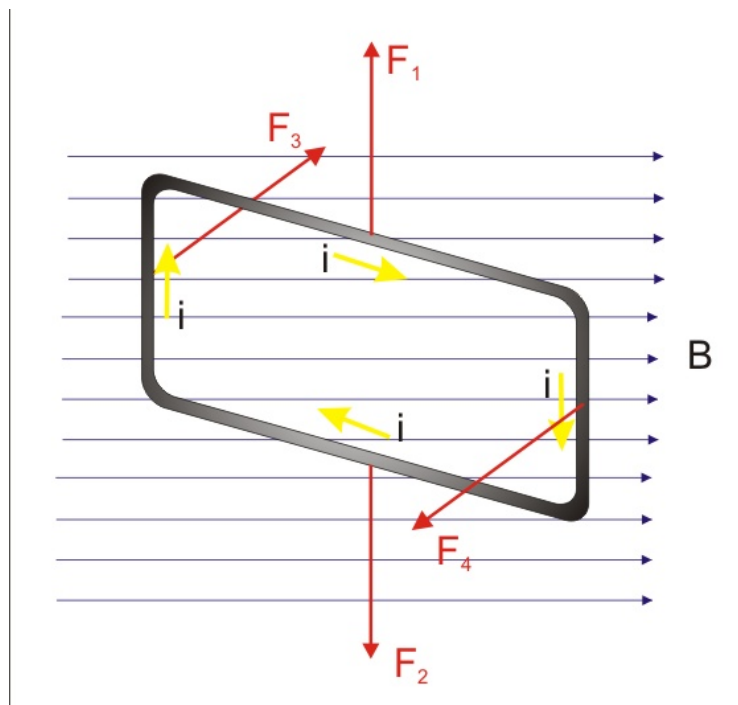


Figura 2.5:

Al considerar  $\mathbf{B}$  constante entonces

$$\boldsymbol{\tau} = -\mathbf{B} \times \int_v \mathbf{r} \times \mathbf{J}$$

Ahora usmos la definición de momento magnético 2.17 para expresar la torca como:

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m} \times \mathbf{B} \quad (2.30)$$

o en magnitud:

$$\tau = mB \sin \theta$$

Ésta torca tiende a alinear el momento magnético (el vector de momento magnético es normal a la superficie que encierra el anillo de corriente) con el campo magnético externo  $\mathbf{B}$ . Por lo tanto podemos asociar una energía potencial al sistema campo-dipolo por medio del trabajo necesario para rotar al dipolo.

$$W = \int_{\theta} \tau = mB \int_{\theta} \sin \theta = -mB \cos \theta = u_m$$

Por lo tanto, la energía potencial asociada al sistema campo-dipolo es

$$u_m = -mB \cos \theta = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{m} \quad (2.31)$$

## 2.4. El campo magnético molecular

Por alguna razón, un átomo, una molécula o algo que sea así de pequeño, siente en promedio, un campo magnético mayor al que sentiría, digamos, un alfiler dentro de un material. Probablemente sea debido a que en zonas del orden de magnitud de unas cuantas moléculas, sus respectivos momentos dipolares magnéticos se hallan ordenados, y por tanto, contribuyen de manera cooperativa para aumentar el campo magnético en esa pequeña vecindad. En cambio, un alfiler es tan grande pero tan grande, que no ve ningún orden en los momentos magnéticos moleculares. Pudiera haber razones con mayor o menor tinte teológico pero desgraciadamente, están muy, muy, muy fuera del alcance de este manual. En fin, sea cual fuese la razón, el cálculo tradicional del campo magnético molecular se da a continuación.

Apliquemos un campo  $\mathbf{B}_{aplicado}$  constante y con dirección  $\hat{\mathbf{k}}$  sobre un material. Este campo magnetiza al material. Supongamos que es un material decente y por tanto la magnetización tiene la dirección del campo magnético aplicado.

$$\mathbf{M} = M_0 \hat{\mathbf{k}} \quad (2.32)$$

Entonces, el campo magnético tradicional, es decir, aquel que medimos macroscópicamente con un aparato, está dado por  $\mathbf{B}$ . El campo magnético local se obtiene considerando que existe una corriente superficial alrededor del punto en cuestión, y además, naturalmente, considerando el campo magnético de las moléculas vecinas, es decir.

$$\mathbf{B}_m = \mathbf{B} + \mathbf{B}_s + \mathbf{B}_{vecinos} \quad (2.33)$$

Dónde  $\mathbf{B}_s$  es el campo magnético producido por la corriente superficial. Pero resulta que el campo magnético de los átomos vecinos tiende a anularse:

$$\mathbf{B}_{vecinos} = 0 \quad (2.34)$$

Usted podría dudar del hecho anterior y realizar el cálculo... pero sería herejía. Calculemos entonces el campo producido por la corriente superficial y para ello simplifiquemos dicha superficie considerandola como una esfera. Desde la figura podemos intuir la

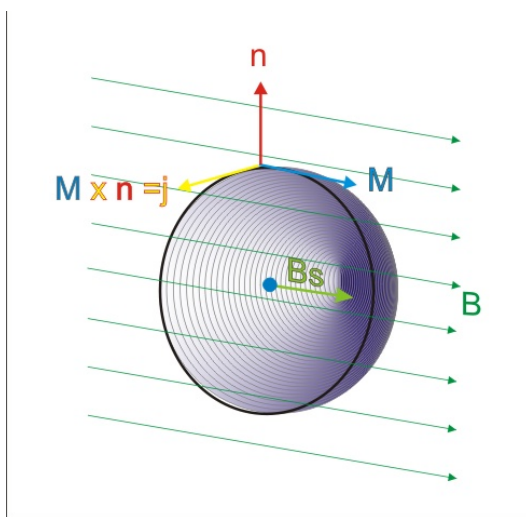


Figura 2.6:

dirección del campo magnético  $\mathbf{B}_s$  en el centro de la esfera ( $\mathbf{r}^*$ ). De la ecuación 2.2

$$\mathbf{B}_s(\mathbf{r}^*) = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_s \frac{\mathbf{j} \times (\mathbf{r}^* - \mathbf{r})}{|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}|} \quad (2.35)$$

Con ayuda de la ecuación 2.22 y del hecho  $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$

$$\mathbf{H}_s = \frac{1}{4\pi} \oint_s \frac{\mathbf{M} \times \hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{r}^* - \mathbf{r})}{|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}|}$$

para facilitarnos el cálculo consideremos que el origen de nuestro sistema de coordenadas coincide con el origen del centro de la esfera. Entonces  $\mathbf{r}^* = 0$  y  $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{r}'$ :

$$\mathbf{H}_s = \frac{1}{4\pi} \oint_s \frac{(M_0 \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{r}') \times \mathbf{r}'}{r'^3} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{(M_0 \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{r}') \times \mathbf{r}'}{r'^3} r'^2 \sin \theta d\theta d\varphi$$

desarrollaremos en coordenadas esféricas a  $M_0 \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{r}'$

$$\begin{aligned} M_0 \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{r}' &= M_0 \hat{\mathbf{k}} \times (\sin \theta \cos \varphi \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta \sin \varphi \hat{\mathbf{j}} + \cos \theta \hat{\mathbf{k}}) = \\ &= M_0 (\hat{\mathbf{j}} \sin \theta \cos \varphi - \hat{\mathbf{i}} \sin \theta \sin \varphi) \end{aligned}$$

entonces

$$(M_0 \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{r}') \times \mathbf{r}' = r' M_0 (-\hat{\mathbf{k}} \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \hat{\mathbf{i}} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi - \hat{\mathbf{k}} \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \hat{\mathbf{j}} \sin \theta \cos \theta \sin \varphi)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_s &= \frac{M_0 \hat{\mathbf{k}} r'^3}{4\pi r'^3} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi \sin \theta d\theta d\varphi) = \\ &= \frac{\mu_0 \hat{\mathbf{k}} 2\pi}{4\pi} \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta = \frac{\mu_0 \hat{\mathbf{k}}}{2} \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2M_0 \hat{\mathbf{k}}}{3} \\ \mathbf{H}_s &= \frac{2\mathbf{M}}{3} \end{aligned} \quad (2.36)$$

Las integrales en las componentes  $\hat{\mathbf{i}}$  y  $\hat{\mathbf{j}}$  se eliminan porque  $\int_0^{2\pi} \sin \varphi = 0$  y  $\int_0^\pi \sin \theta \cos \theta d\theta = \int_0^\pi \frac{\sin 2\theta}{2} d\theta = 0$ . Y entonces:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_m &= \mathbf{H} + \mathbf{H}_s = \mathbf{H} + \frac{2}{3}\mathbf{M} \\ \Rightarrow \frac{\mathbf{B}_m}{\mu_0} &= \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} + \frac{2}{3}\mathbf{M} \\ \mathbf{B}_m &= \mathbf{B} + \mu_0 \frac{2}{3}\mathbf{M} \end{aligned} \quad (2.37)$$

## 2.5. El diamagnetismo de Langevin

Un material diamagnético es aquel que en cuanto se somete a un campo magnético externo  $\mathbf{B}_0$ , tiene un campo magnético  $\mathbf{B}$  en su interior menor que  $\mathbf{B}_0$ . Como se verá a continuación esto provoca que el material rechaze el campo  $\mathbf{B}_0$ . Esto quiere decir que la constante de permeabilidad magnética  $k_m$  es menor que 1.

$$\mathbf{B} = k_m \mathbf{B}_0 \quad (2.38)$$

la explicación clásica del diamagnetismo viene directamente de la ley de Lenz.

“En un circuito conductor cerrado, la corriente inducida aparece en una dirección tal que ésta se opone al cambio que la produce”

Desde un punto de vista clásico, los electrones giran alrededor del núcleo del átomo, comportándose entonces como si hubiera una corriente en un anillo conductor. Entonces, al aplicarse el campo externo  $\mathbf{B}_0$  hay un cambio en el flujo magnético a través del anillo. Siguiendo la ley de Lenz, debe aparecer una corriente inducida que se oponga al aumento del flujo magnético. Es decir, la corriente inducida producirá un campo magnético  $\mathbf{B}'$  que se opondrá al campo magnético externo aplicado:  $\mathbf{B}_0$ . Dado que  $\mathbf{B}'$  está en dirección contraria a  $\mathbf{B}_0$  el campo neto dentro del material  $\mathbf{B}$  es menor que  $\mathbf{B}_0$ .

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 - \mathbf{B}' \quad (2.39)$$

Como ejemplo considerese un electrón que gira alrededor de un átomo, como se ve en *a*) de la figura. Luego acercamos por la izquierda el polo norte de un imán (inciso *b*)). Entonces hay un aumento de flujo que según la ley de Lenz, deberá ser contrareestado mediante una corriente inducida  $j'$ . La regla de la mano derecha nos dice que  $i'$  debe ir en el sentido mostrado en el *c*) de la figura. Como puede observarse, el campo  $\mathbf{B}'$  inducido es opuesto a  $\mathbf{B}_0$ . Por último, la aparición de la corriente inducida  $i'$  es equivalente a considerar una corriente  $i_{\text{neta}}$  o  $i_{\text{neta}}$ .

$$i_{\text{neta}} = i - i' \quad (2.40)$$

Es decir, en este caso, la corriente tiene que disminuir para cumplir con la ley de Lenz. Para que la corriente disminuya es necesario que la velocidad angular  $w$  decrezca también. En el caso opuesto, es decir, si hubieramos acercado el polo sur del imán, puede usted seguir el mismo razonamiento y encontrar que el campo  $\mathbf{B}'$  inducido también se opone a  $\mathbf{B}_0$  pero que ahora, esto se logra con

$$i_{\text{neta}} = i + i' \quad (2.41)$$

Ahora, cuantifiquemos el razonamiento anterior. Imaginemos un electrón muy feliz girando alrededor de un núcleo, también muy feliz puesto que no hay campo magnético externo. Entonces, aplicando las leyes de Newton:

$$\mathbf{F}_{\text{coulomb}} = m_e w_0^2 R \quad (2.42)$$

Luego apliquemos un campo magnético  $\mathbf{B}_0$  perpendicular al plano de la órbita. Aplicando nuevamente las leyes de Newton tenemos:

$$\mathbf{F}_{\text{coulomb}} + \mathbf{F}_{\text{magnética}} = m_e (w_0 \pm \Delta w)^2 R \quad (2.43)$$

Sustituyendo la ecuación 2.55 en 2.56

$$m_e w_0^2 R + q|\mathbf{v} \times \mathbf{B}| = 2m_e w_0^2 \pm m_e R w_0 \Delta w + m_e R \Delta w^2$$

podemos despreciar el término  $m_e R \Delta w^2$  en la ecuación anterior si suponemos que  $\Delta w$  es muy pequeño. Entonces, dado que  $\mathbf{v}$  es perpendicular a  $\mathbf{B}_0$  se tiene

$$qvB = \pm 2m_e w_0 \Delta w R$$

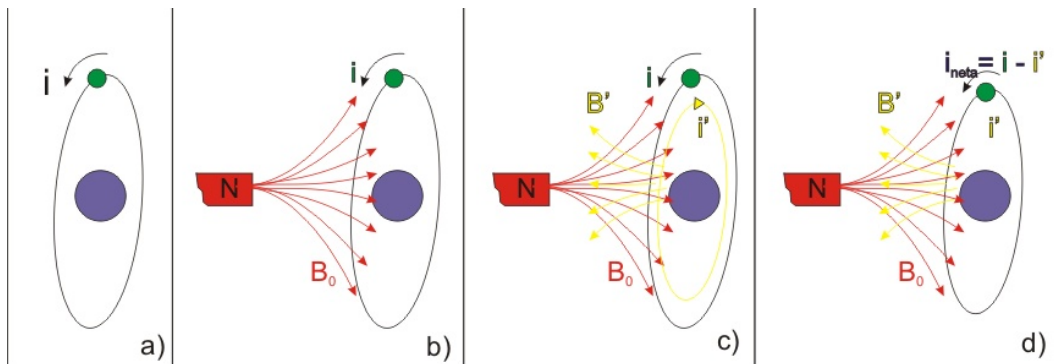


Figura 2.7:



Aproximando  $v = (w_0 + \Delta w)R$  por  $v \simeq w_0 R$  obtenemos

$$\Delta w = \pm \frac{qB}{2m_e} = \mp \frac{eB}{2m_e} \quad (2.44)$$

dónde  $q$  es la carga del electrón y debe incluir el signo respectivo.  $B$  es la magnitud del campo magnético aplicado.

Ahora relacionemos el cambio en la frecuencia angular  $\Delta w$  con un cambio en el momento magnético  $\Delta m$ . El momento magnético está dado por  $\mathbf{m} = I\mathbf{A}$  dónde  $I$  es la corriente en el circuito cerrado y  $\mathbf{A}$  es el área que encierra el circuito. Entonces, si  $T$  es el periodo de un electrón de carga  $q = e$  alrededor del núcleo, la corriente es:

$$I = \frac{q}{T} = \frac{\frac{e}{2\pi}}{w_0 \pm \Delta w} = \frac{e(w_0 \pm \Delta w)}{2\pi} \quad (2.45)$$

y el momento magnético es

$$m = \frac{ew_0 R^2}{2} \pm \frac{e\Delta w R^2}{2} = \frac{ew_0 R^2}{2} \pm \left(\mp \frac{eB}{2m_e}\right) \frac{eR^2}{2} \equiv m_0 + \Delta m \quad (2.46)$$

Porque el área encerrada por el circuito es el área de la órbita del electrón:  $A = \pi R^2$ .

$$\Delta m = -\frac{e^2 R^2}{4m_e} B \quad (2.47)$$

Por lo tanto De la definición de la susceptibilidad magnética  $\mathbf{M} = \chi \mathbf{H} = \chi \frac{\mathbf{B}}{\mu_0}$  obtenemos otra relación

$$\Delta M = N \Delta m = -N \frac{e^2 R^2}{4m_e} B = -\frac{N \mu_0 e^2 R^2}{4m_e} \frac{B}{\mu_0} = \chi \frac{B}{\mu_0}$$

dónde  $N$  es el número de átomos por unidad de volumen. nos queda entonces la siguiente expresión para la susceptibilidad magnética

$$\chi = -\frac{N \mu_0 e^2 R^2}{4m_e} \quad (2.48)$$

Esta ecuación fue obtenida suponiendo que el electrón se halla siempre a una distancia  $R$  del núcleo en una órbita circular plana. pero en el caso de una órbita más caprichosa en tercera dimensión todavía se tienen medios para calcular  $\chi$  pensando en una distancia promedio  $\langle r \rangle$  del electrón respecto al núcleo.

$$\chi = -\frac{N \mu_0 e^2 \langle r^2 \rangle}{6m_e} \quad (2.49)$$

## 2.6. Paramagnetismo

Un material paramagnético es aquel que en presencia de un campo magnético externo  $\mathbf{B}_0$ , responde produciendo un campo magnético propio  $\mathbf{B}'$  en el mismo sentido que  $\mathbf{B}_0$ , produciendo un campo neto  $\mathbf{B} > \mathbf{B}_0$  en el interior del material. Por lo tanto, en los materiales

paramagnéticos  $k_m$  es mayor que 1 según la ecuación 2.38.

El paramagnetismo se origina porque un dipolo magnético (un circuito de corriente) tiende a alinearse en la dirección del campo magnético aplicado  $\mathbf{B}_0$ . Dónde por "alineación" de un dipolo entendemos que es el vector de momento dipolar  $\mathbf{m}$  el que se alinea con  $\mathbf{B}_0$ . A su vez, el dipolo magnético produce un campo magnético  $\mathbf{B}'$  en la dirección y sentido de  $\mathbf{m}$ . Así pues,  $\mathbf{B}'$  se alinea con  $\mathbf{B}_0$  y el campo magnético resultante es mayor. Este tipo de materiales son atraídos por  $\mathbf{B}_0$ .

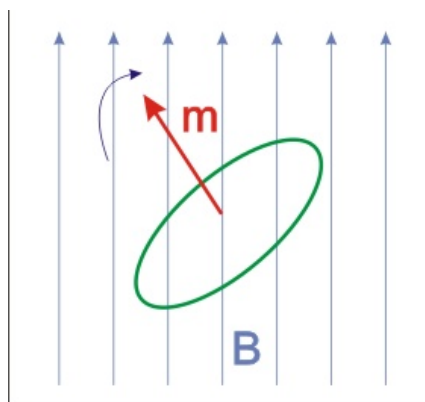


Figura 2.8:

Abordemos ahora el paramagnetismo desde un punto de vista cuántico. Hasta ahora hemos relacionado el momento magnético  $\mathbf{m}$  de un sistema formado por un electrón girando en una órbita circular alrededor de un núcleo, con su momento angular  $\mathbf{L}$

$$\mathbf{m} = I\mathbf{A} = \frac{-ewR^2}{2} = \frac{-e}{2m_e}(R)(m_eRw) = \frac{-e}{2m_e}\mathbf{R} \times \text{athbfp} = \frac{-e}{2m_e}\mathbf{L} \quad (2.50)$$

En la teoría cuántica todas las partículas elementales tienen un momento magnético intrínseco relacionado con su momento angular intrínseco  $\mathbf{S}$  llamado espín, mediante una ecuación similar a la 2.50. Adicionalmente algo que esté formado por partículas elementales como por ejemplo, un átomo, tendría una relación semejante a la 2.50.

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma\mathbf{J} = -g\mu_B\mathbf{J} \quad (2.51)$$

dónde  $\mathbf{J}$  es la suma de todos los momentos angulares de las partículas, ya sea debido a momentos angulares por rotación ( $\mathbf{L}$ ) o intrínsecos ( $\mathbf{S}$ ).

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} \oplus \mathbf{S} \quad (2.52)$$

dónde el símbolo  $\oplus$  significa que ésta operación sigue las reglas de Hund, las cuales veremos en el siguiente capítulo. A la constante  $\gamma$  se le llama razón giromagnética y sirve para poder ajustar los experimentos a la ecuación 2.38. A la constante  $\mu_B$  se le conoce como magnetón de Bohr y tiene un valor de

$$\mu_B = \frac{e}{2m} \quad (2.53)$$

A la constante  $g$  se le conoce como factor de desdoblamiento espectroscópico y tiene una función similar a  $\gamma$  solo que  $g$  puede calcularse teóricamente

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{3J(J+1)}$$

Sabemos que un dipolo en un campo magnético externo tiene una energía dpotencial de  $U = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$  según la ecuación 2.31. Dónde  $\mathbf{m}$  es el momento magnético. Dado que un átomo también tiene un momento magnético  $\mu$ , entonces un átomo dentro de un campo magnético externo tendrá una energía de

$$U = -\mu \cdot \mathbf{B} \quad (2.54)$$

Sin embargo, según la mecánica cuántica, la proyección del vector  $\mu$  sobre el vector  $\mathbf{B}$  solo puede tomar valores discretos, por lo tanto la energía dada por 2.54 se discretiza:

$$U = -\mu \cdot \mathbf{B} = m_J g \mu_B B \quad (2.55)$$

dónde  $m_J g \mu_B$  es la proyección de  $\mu$  sobre  $\mathbf{B}$  y a  $m_J$  se le conoce cómo número cuántico azimutal y tiene los valores

$$m_J = J, J-1, \dots, -J \quad (2.56)$$

Como ejemplo consideremos el caso de un átomo con un único electrón dónde el momento magnético orbital neto es cero ( $L = 0$ ). Entonces la única contribución al momento magnético total proviene del espín (spin) del electrón, por lo tanto, usando las ecuaciones 2.52, 2.55 y 2.56 se tiene

$$\begin{aligned} |J| &= L \oplus S = S = \frac{1}{2} \\ m_J &= J, J+1, \dots, -J = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \\ g &= 1 + \frac{J(J+1) + J(J+1) - J(J+1)}{2J(J+1)} = 1 + \frac{1}{2J} \\ U &= \pm \mu_B B \end{aligned} \quad (2.57)$$

Lo cual significa que el átomo considerado (con momento orbital cero y con un solo electrón) tiene solamente dos estados de energía disponibles. Sabemos que estadísticamente siempre hay más átomos en los niveles bajos de energía que en los niveles más altos. Es decir, los estados de mayor energía tienen menor probabilidad de estar ocupados que los estados menos energéticos. Ésto se expresa matemáticamente considerando que la cantidad de átomos en un estado con energía  $U$  es proporcional a  $N(U) = e^{-U/(k_B T)}$  (distribución de Maxwell). Entonces si  $\tau \equiv k_B T$  la proporción de átomos con energía  $U$  es:

$$P(U) = \frac{N(U)}{\sum_i N(U_i)} = \frac{e^{-U/\tau}}{\sum_i N(U_i)} \quad (2.58)$$

Con la ecuación 2.58 podemos obtener el promedio (o valor esperado) de cualquier propiedad  $A$  que dependa de la energía  $U$ :

$$\begin{aligned} \text{Sea } A_1 &= A(U_1) \\ A_2 &= A(U_2) \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned}$$

entonces

$$\langle A \rangle = A_1 P(U_1) + A_2 P(U_2) + \dots \quad (2.59)$$

Por ejemplo, calcularemos el valor esperado de  $\mu$  cuando  $\mu$  es paralelo al campo externo  $\mathbf{B}$ , es decir

$$U = \mu \cdot \mathbf{B} = \mu B \quad (2.60)$$

$$U_1 = \mu B$$

$$U_2 = -\mu B$$

$$A_1 = \mu_1 = \mu$$

$$A_2 = \mu_2 = -\mu$$

$$P(U_1) = \frac{e^{-\mu B/\tau}}{\sum_i N(U_i)}$$

$$P(U_2) = \frac{e^{+\mu B/\tau}}{\sum_i N(U_i)}$$

$$\sum_i N(U_i) = e^{-U_1/\tau} + e^{-U_2/(k_B T)} = e^{-\mu B/\tau} + e^{\mu B/\tau}$$

Entonces

$$\langle \mu \rangle = \frac{\mu e^{-\mu B/\tau} + (-\mu) e^{\mu B/\tau}}{e^{-\mu B/\tau} + e^{\mu B/\tau}}$$

$$\langle \mu \rangle = \mu \tanh(\mu B/\tau)$$

Un procedimiento alternativo para calcular el promedio del momento magnético  $m$  es usando la función de partición de  $z$ , como se muestra a continuación.

Empezamos de manera similar usando la distribución de Maxwell de la energía:  $\rho(u) = e^{u/(k_B T)}$ , entonces:

$$\langle m(u) \rangle = \frac{\int e^{-u/\tau} m(u) du}{\int e^{-u/\tau} du} = \frac{e^{-u/\tau} \frac{u}{B} du}{\int e^{-u/\tau} du}$$

dónde hemos usado la ecuación 2.60. Además notamos que

$$\frac{\partial}{\partial T} \int e^{-u/(k_B T)} du = \int e^{-u/(k_B T)} \frac{u}{k_B T^2} du = \frac{1}{k_B T^2} \int e^{-u/k_B T} \frac{u}{B} B du$$

Entonces

$$\langle m(u) \rangle = \frac{k_B T^2}{B} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\int e^{-u/\tau} du}{\int e^{-u/\tau} du}. \quad (2.61)$$

si

$$\int e^{-u/\tau} du = e^{-U_1/\tau} + e^{-U_2/\tau} = e^{U/\tau} + e^{-U/\tau}. \quad (2.62)$$

Entonces

$$\frac{\partial}{\partial T} \int e^{-u/(k_B T)} du = \frac{U}{k_B T^2} (e^{U/\tau} - e^{-U/\tau}) \quad (2.63)$$

Sustituyendo las ecuaciones 2.62, 2.63 en la ecuación 2.61 llegamos al resultado esperado:

$$\langle m(u) \rangle = \frac{\frac{U}{B}e^{U/\tau} - \frac{U}{B}e^{-U/\tau}}{e^{U/\tau} + e^{-U/\tau}} = \frac{\mu e^{U/\tau} - \mu e^{-U/\tau}}{e^{U/\tau} + e^{-U/\tau}} = \mu \tanh(\mu B/\tau)$$

Un átomo con momento angular de número cuántico  $J$  situado en un campo magnético, posee  $2J + 1$  niveles de energía igualmente espaciados como indica la ecuación 2.56. Para este caso

$$\langle m \rangle = gJ\mu_B \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{(2J+1)gJ\mu_B B/k_B T}{2J} - \frac{1}{2J} \coth \frac{gJ\mu_B B/k_B T}{2J} \quad (2.64)$$

$$\text{cuando } \frac{B}{T} \ll 1 \text{ se tiene } M \simeq B \frac{C}{T} \quad (2.65)$$

dónde a

$$C = \frac{g^2 J(J+1)\mu_B^2}{3k_B} \quad (2.66)$$

se le conoce como Constante de Curie. A la ecuación 2.65 se le llama Ley de Curie.

Ahora expliquemos cuales son las reglas de la operación  $\oplus$ . Estas reglas se aplican a cada capa de un átomo y determinan el orden en que los electrones ocupan los orbitales en el estado fundamental.

Reglas de Hund.

1. El valor del espín total  $S$  es el máximo permitido por el principio de exclusión de Puli.
2. El valor del momento angular orbital  $L$  es el máximo compatible con este valor de  $S$ .
3. El valor del momento angular total  $J$  es  $|L - S|$  cuando menos de la mitad de la capa está ocupada y  $L + S$  cuando más de la mitad de la capa está ocupada. Cuando la capa esta llena justamente a la mitad,  $L = 0$ , y entonces,  $J = S$ .

## 2.7. Ferromagnetismo

Se dice que un material es ferromagnético cuando posee un momento magnético incluso en ausencia de campo magnético externo. Por ello se dice que estos materiales presentan un campo magnético espontáneo.

Considere una barra de hierro. Al acercarla a un imán permanente el hierro se magnetiza y así permanece aún cuando se ha retirado el imán, pudiéndose levantar pequeños trozos de hierro con la barra. Este momento magnético espontáneo solo existe por debajo de una temperatura llamada "Temperatura de Curie" es mayor entre más frío esté el material. Cuando  $T = 0$  el momento magnético espontáneo es máximo y se le conoce como momento de saturación.

La existencia del momento magnético espontáneo nos hace suponer que los momento dipolares atómicos interaccionan de tal manera que se mantienen ordenados aún cuando se suprime el campo magnético externo. Éste orden puede darse de distintas maneras:

- Cuando todos los espines señalan a una sola dirección decimos que el orden es propio del ferromagnetismo simple.
- Cuando se intercalan espines hacia arriba y hacia abajo decimos que el orden es propio del Ferrimagnetismo.
- También está la disposición helicoidal de espines y un montón más de configuraciones caprichosas.

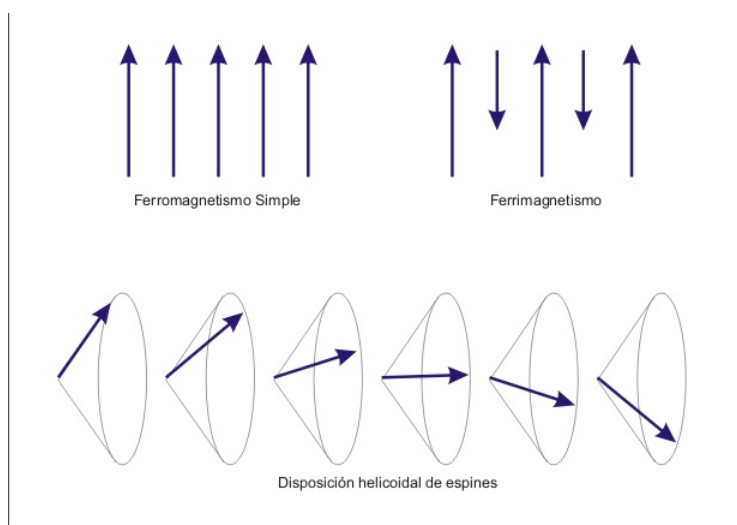


Figura 2.9:

Abordemos ahora el problema de materializar la interacción interna mencionada arriba, responsable de mantener el orden de los espines. A esa interacción interna se le conoce como "interacción de canje", y una de las formas más sencillas para manejarla es considerarla equivalente a un campo magnético  $B_E$  (el campo de canje). En otras palabras, suponemos que la interacción interna de los espines produce un campo neto  $B_E$  que actúa sobre cada átomo. Lo cual es una suposición fuerte ya que  $B_E$  puede llegar a 10 000 Teslas!

Admitiremos también que cada átomo está sometido a un campo proporcional a  $M$  (son suposiciones fuertes pero que producen resultados muy útiles).

$$B_E = \lambda m. \quad (2.67)$$

Dónde  $\lambda$  es una constante independiente de la temperatura. Como se dijo arriba, la temperatura de curie  $T_c$  es la temperatura por encima de la cual desaparece el momento magnético espontáneo; es decir, separa la fase paramagnética desordenada en el rango  $T > T_c$  de la fase ordenada ferromagnética a  $T < T_c$ .

Cuando el material se encuentra en la fase paramagnética ( $T > T_c$ ) un campo aplicado  $B_a$  originará un momento magnético finito que, a su vez, engendra un campo finito de canje  $B_E$ . Entonces si  $\chi_P$  es la susceptibilidad paramagnética.

$$\mu M = \chi_P(B_a + B_E) \quad (2.68)$$

Se supuso que nos hallamos en la fase paramagnética porque la magnetización  $M$  solo puede escribirse en la forma del producto de una susceptibilidad constante por un campo (como en la ecuación 2.68) cuando la fracción de los espines alineados es pequeña (cuando todos los espines ya están ordenados ya no es posible aumentar la magnetización al aumentar el campo aplicado  $B_a$ ). La susceptibilidad paramagnética viene dada por la ley de Curie (ecuación 62b).

$$\chi \equiv \frac{M}{B_a} = \frac{C}{T - C\lambda} \quad (2.69)$$

En la ecuación anterior cuando  $T_c \equiv C\lambda$ ,  $\chi$  es infinita. Esto significa que aunque no haya campo magnético aplicado ( $B_a = 0$ )  $M$  tiene un valor definido. Por ello a  $T_c$  se le conoce como Temperatura de Curie, porque en  $T = T_c$  empieza el comportamiento ferromagnético. Evidentemente la ecuación 70 no describe correctamente el comportamiento ferromagnético del material para  $T < T_c$ . Desgraciadamente no encontré una ecuación que describa a  $\chi$  por debajo de  $T_c$ .

De la ecuación 2.69 tenemos la Ley de Curie-Weiss

$$\chi = \frac{C}{T - T_c} \text{ con } T_c = C\lambda \quad (2.70)$$

Con las ecuaciones 2.70 y 2.66 podemos determinar el valor de la constante  $\lambda$  de la ecuación 2.67.

$$\lambda = \frac{B_E}{M} = \frac{T_c}{C} = \frac{3k_B T_c}{Ng^2 S(S+1)\mu_B^2} \quad (2.71)$$

Para el hierro  $T_c \sim 1000K$ ,  $g = 2$  y  $S = 1$  y entonces de la ecuación 2.72 se obtiene  $\lambda = 5000$ . Con  $M \simeq 1700$  se tiene  $B_E = \lambda M \sim 5000 * 1700 \sim 10^3 \text{ Teslas}$ .

El campo  $B_E$  es solo una representación de la interacción de intercambio. En la mecánica cuántica, puede demostrarse (bajo ciertas hipótesis) que la energía de interacción de átomos  $i, j$  de espines  $S_i, S_j$  contiene un término:

$$-2JS_i \cdot S_j \quad (2.72)$$

Dónde a  $J$  se le conoce como integral de intercambio y es relacionada con el solapamiento de las distribuciones de carga de los átomos  $i, j$ .

En el caso de un ferromagnético simple, la energía de interacción de  $N$  átomos es hilera con un espín  $S$  cada uno es:

$$U = -2J \sum_{p=1}^N S_p \cdot S_{p+1} \quad (2.73)$$

Esta energía de interacción es la que antes se consideró que provenía de la interacción entre momentos magnéticos atómicos y el campo de intercambio  $B_E$

$$U = \sum_{p=1}^N \mu_p \cdot B_E p \quad (2.74)$$

Ahora seamos testigos del nacimiento de un Magnón: una onda de perturbación de los espines. De la ecuación 2.73 sacamos los términos que engloban el espín  $p$  -ésimo. Esto equivale a tomar únicamente la energía que aporta el  $p$  -ésimo espín.

$$-2JS_p \cdot (S_{p-1} + S_{p+1}) \quad (2.75)$$

usando la ecuación 2.51 hacemos  $m\mu_p = -g\mu_B S_p$  y entonces la ecuación 2.75 se escribe:

$$-\mu_p \cdot [(-2J/g\mu_B)(S_{p-1} + S_{p+1})] \quad (2.76)$$

que es de la forma  $\mu_p \cdot B_p$  (ecuación 2.74. Es decir, el campo magnético de canje que actúa sobre el  $p$ -ésimo espín es:

$$B_p = (-2J/g\mu_B)(S_{p+1} + S_{p-1}) \quad (2.77)$$

Si ahora recordamos que

$$\frac{\partial \hbar S_p}{\partial t} = \tau_p = \mu_p \times B_p \quad (2.78)$$

tenemos al usar las ecuaciones 2.77 y 2.78.

$$\frac{\partial S_p^x}{\partial t} = \frac{2J}{\hbar} [S_p^y (S_{p-1}^z + S_{p+1}^z) - S_p^z (S_{p-1}^y + S_{p+1}^y)] \quad (2.79)$$

y análogamente para  $\frac{\partial S_p^y}{\partial t}$  y  $\frac{\partial S_p^z}{\partial t}$ . Resolver este sistema de ecuaciones es muy complicado debido a los productos de  $S_p^i S_p^j$ . Pero si suponemos que los espines giran alrededor del eje  $z$  como en la figura, y suponemos que  $S^x$  y  $S^y$  son mucho menores que  $S^z$  (oscilación pequeña) entonces obtenemos un sistema aproximado de ecuaciones lineales al despreciar los productos entre  $S^x$  y  $S^y$ :

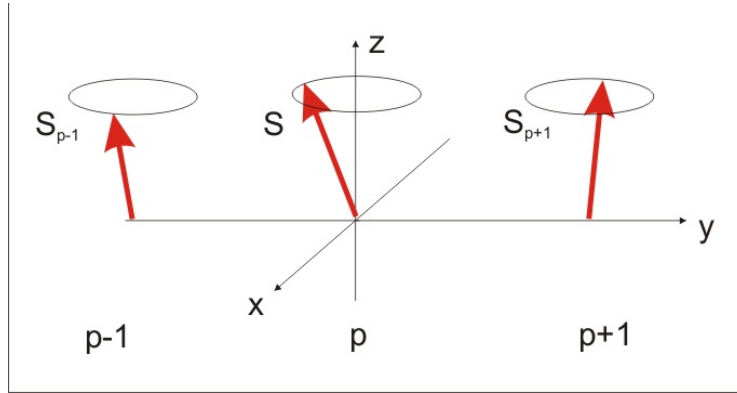


Figura 2.10:

$$\frac{\partial S_p^x}{\partial t} = \frac{2JS^z}{\hbar} (2S_p^y - S_{p-1}^y - S_{p+1}^y) \quad (2.80)$$

$$\frac{\partial S_p^y}{\partial t} = -\frac{2JS^z}{\hbar} (2S_p^x - S_{p-1}^x - S_{p+1}^x) \quad (2.81)$$

$$\frac{\partial S_p^z}{\partial t} = 0 \quad (2.82)$$



Como soluciones proponemos:

$$S_p^x = ue^{i(pka-wt)} \quad S_p^y = ve^{i(pka-wt)} \quad (2.83)$$

dónde  $u$  y  $v$  son constantes,  $p$  es evidentemente un entero y  $a$  es la constante de red. Al sustituir en las ecuaciones 2.80 y 2.81 se obtiene.

$$\begin{aligned} -i\omega u &= \frac{2JS}{\hbar}(2 - e^{-ika} - e^{ika})v = \frac{4JS}{\hbar}(1 - \cos ka)v \\ -i\omega v &= -\frac{2JS}{\hbar}(2 - e^{-ika} - e^{ika})u = -\frac{4JS}{\hbar}(1 - \cos ka)u \end{aligned}$$

Para el par de variables  $u, v$  este sistema de ecuaciones tiene solución solamente cuando el determinante de los coeficientes de  $u$  y  $v$  es cero.

$$\begin{vmatrix} i\omega & \frac{4JS}{\hbar}(1 - \cos ka) \\ -\frac{4JS}{\hbar}(1 - \cos ka) & i\omega \end{vmatrix} = 0$$

de dónde se obtiene

$$\hbar\omega = 4JS(1 - \cos ka) \quad (2.84)$$

Ésta es la relación de dispersión para las ondas de espín, es decir, los magnones. Con esta solución se encuentra al sustituir la ecuación 2.84 en ?? que  $v = -iu$  y entonces la parte real de las ecuaciones 2.83 son:

$$S_p^x = u \cos(pka - wt) \quad S_p^y = u \sin(pka - wt) \quad (2.85)$$

lo que equivale a una precesión circular del espín  $p$  alrededor del eje  $z$ . Para longitudes de onda muy largas  $\lambda \rightarrow \infty, k \rightarrow 0$  y  $ka \ll 1$ . Entonces

$$(1 - \cos ka \cong \frac{1}{2}ka^2)$$

y la ecuación 2.84 queda

$$\hbar\omega \cong 2JSa^2k^2 \quad (2.86)$$

Un análisis cuántico revela que la energía de una onda de espines de frecuencia  $\omega$  es

$$\epsilon = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (2.87)$$

dónde  $n$  es un número cuántico y representa el número de magnones en la onda, tal y como en una onda electromagnética  $\epsilon = n\hbar\omega$ ,  $n$  representa el número de fotones. Ahora, admitamos las oscilaciones de espín en el primer y  $N - \text{ésimo}$  átomos, son iguales:

$$S_1^x = u \cos(ka - wt) = u \cos(Nka - wt) = S_N^x \quad (2.88)$$

entonces

$$\begin{aligned} ka - wt &= Nka - wt - 2\pi \quad \text{dónde } q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ \Rightarrow Nka &= 2\pi q \end{aligned} \quad (2.89)$$

$$k = \frac{2\pi q}{Na} \quad (2.90)$$

La ecuación 2.90 expresa la cuantización de los valores posibles del vector de onda  $k$ , lo que conlleva, según las ecuaciones 2.86 y 2.87, a una segunda restricción en los valores posibles de la energía de la onda.

Ahora, hagamos una serie de aproximaciones para una de espín viajera en tres dimensiones.

1. Suponer que las amplitudes de la oscilación en el eje  $x$  y  $y$  están dados por  $S_p = u \cos(k_x pa - wt) \cos(k_y pa - wt) \cos(k_z pa - wt)$
2. Suponer que la relación de dispersión es la indicada por la ecuación 2.86:  $\hbar w = 2JS(ka)^2$ . Recuerdese que ésta ecuación es una aproximación para ondas de espín en 1 dimensión cuando  $\lambda \rightarrow \infty$
3. Suponer que la cuantización de las  $k$  siguen una relación como indica la ecuación 2.90:  $k_x = \frac{2\pi}{Na} q_x$ ,  $k_y = \frac{2\pi}{Na} q_y$ ,  $k_z = \frac{2\pi}{Na} q_z$ , donde  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2$ .

A cada triplete  $(k_x, k_y, k_z)$  le llamamos "modo". Porque es un modo de movimiento posible para una onda de espines. Y entonces podemos preguntarnos. ¿Cuántos modos (tripletes) existen tales que su magnitud se encuentra entre dos valores dados:  $|k_1|$  y  $|k_2|$ . Es decir, ¿Cuántos modos  $\Delta N$  hay en el intervalo  $\Delta k$ ?

Dado que sabemos que  $k = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  podemos intentar resolver éste problema de manera geométrica. Cada terna  $(k_x, k_y, k_z)$  es un posible modo. Además el espaciamiento entre las  $k_x$  es uniforme según la segunda suposición:  $\Delta k_{xconsecutivos} = \frac{2\pi}{Na}$ , y de manera similar  $\Delta k_{yconsecutivos} = \frac{2\pi}{Na}$  y  $\Delta k_{zconsecutivos} = \frac{2\pi}{Na}$ .

Entonces un modo ocupa un volúmen en el espacio  $k$  de:

$$\Delta k_{xconsecutivos} \Delta k_{yconsecutivos} \Delta k_{zconsecutivos} = \left( \frac{2\pi}{Na} \right)^3 \quad (2.91)$$

Lo que es equivalente a decir que hay un modo por unidad de volúmen  $\left( \frac{2\pi}{Na} \right)^3$

$$\frac{dN}{dk^3} = \frac{1}{\left( \frac{2\pi}{Na} \right)^3} = \frac{1}{\frac{8\pi^3}{V}} \quad (2.92)$$

dónde  $V = (Na)^3$ . Para obtener la densidad de modos  $\frac{dN}{dw}$  podríamos proseguir sencillamente como el libro Kittel. Pero en vez de ello demosle unas cuantas vueltas al asunto.

Así como  $\frac{dN}{dk^3}$  significa el número de estados que hay en un volúmen cúbico  $dk^3 = dk_x dk_y dk_z$ ,  $\frac{dN}{dk}$  significa el número de estados que hay en un volúmen de cascarón encerrado por dos  $k$  arbitrarias:  $k_1$  y  $k_2$  (vease figura). Para convertir un volúmen cúbico  $dk^3$  en un volúmen de cascarón  $dk$  se procede de la siguiente forma:

$$dk^3 = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} k^2 \sin \theta d\varphi d\theta dk = 4\pi k^2 dk$$

y usando la ecuación 2.86

$$dk^3 = 4\pi k^2 dk = 4\pi \frac{w}{a^2 2JS} dk \quad (2.93)$$

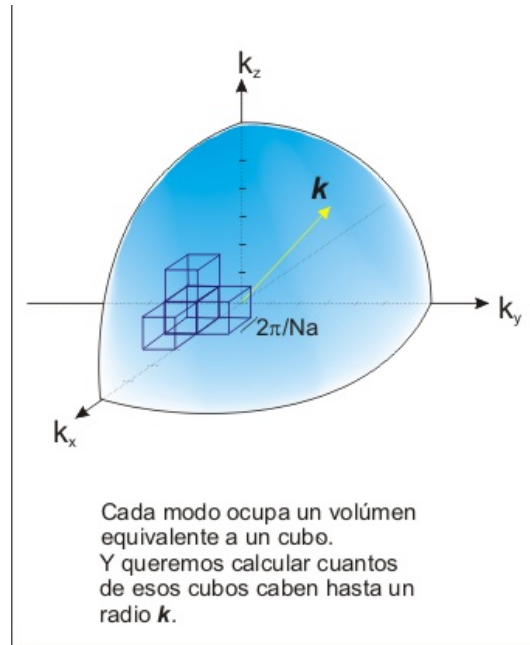


Figura 2.11:

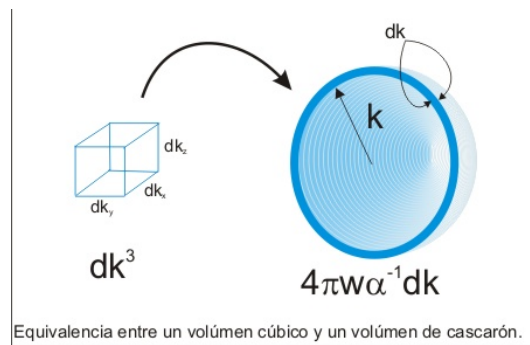


Figura 2.12:

$$\frac{dk^3}{dk} = 4\pi \frac{w}{\alpha}$$

dónde  $\alpha \equiv a^2 2JS$ . A partir de la aproximación 2 obtenemos  $\frac{dw}{dk}$

$$\frac{dw}{dk} = 2JS \frac{d}{dk} (ka)^2 = 2JS 2ka = 4JS \sqrt{\frac{w}{a^2 2JS}} a^2 = \frac{4JS a^2}{\sqrt{2JS a^2}} \sqrt{w} = \frac{1}{2} \sqrt{w\alpha}$$

entonces

$$\frac{dk}{dw} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{w\alpha}} dw \quad (2.94)$$

Por lo tanto, usando las ecuaciones 2.92, 2.93 y 2.94 obtenemos  $D(w) \equiv \frac{dN}{dw}$ .

$$D(w) = \frac{dN}{dw} = \frac{dN}{dk^3} \frac{dk^3}{dk} \frac{dk}{dw} = \left( \frac{V}{8\pi^3} \right) \left( 4\pi \frac{w}{\alpha} \right) \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{w\alpha}} \right)$$

$$D(w) = \frac{V}{4\pi} \sqrt{\frac{w}{\alpha^3}} \quad (2.95)$$

A partir de la densidad de estados para magnones (ecuación 2.95) y conociendo el valor medio del número de magnones excitados en un modo  $\mathbf{k}$  ( $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ ), podemos obtener la excitación térmica, es decir, el número total de magnones excitados (en todos los modos posibles) a una temperatura T.

$\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$  viene dado por la distribución de Planck<sup>1</sup>. Y el número total de magnones es entonces:

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp \hbar w_{\mathbf{k}} / \tau - 1}$$

El subíndice de la sumatoria indica que es necesario sumar sobre todos los vectores  $\mathbf{k}$ , pero podemos simplificar esa suma si encontramos una distribución del número de vectores  $\mathbf{k}$  (modos) con magnitud igual, es decir:

$$N(k). \quad (2.96)$$

Y entonces:

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_k N(k) \frac{1}{\exp \hbar w_k / \tau - 1}$$

Además, dada la relación uno a uno entre  $w$  y  $k$ , es posible escribir la ecuación anterior como:

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_k N(w_k) \frac{1}{\exp \hbar w_k / \tau - 1}$$

Por último podemos aproximar la suma anterior mediante una integral, suponiendo que es posible cambiar la distribución discreta 2.96 por una distribución continua  $D(w)$ . Y entonces:

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \int D(w) \langle n(w) \rangle dw = \int D(w) \frac{1}{\exp \hbar w / \tau - 1} dw \quad (2.97)$$

<sup>1</sup>Capítulo 4 del Kittel

Con la ecuación 2.95 esto queda:

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{\hbar}{2JSa^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{w^{1/2}}{\exp(\hbar w/\tau) - 1} = (0,0587)4\pi^2 \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{k_B T}{2JSa^2} \right)^{3/2}$$

A este resultado tambien se le conoce como Ley  $T^{3/2}$  de Bloch.



## Capítulo 3

# Transporte Eléctrico

### 3.1. Conductividad Eléctrica

En el equilibrio térmico, la distribución de la energía para partículas como electrones viene dada por la función de distribución de Fermi.

$$f_0(E(\mathbf{k})) = \frac{1}{e^{[E(\mathbf{k}) - E_F]/T} + 1}$$

Fuera del equilibrio la ecuación anterior es inútil para describir el número de electrones con determinada energía. Para encontrar una distribución  $f$  que sirva fuera del equilibrio imaginemos que nos montamos sobre un electrón con ciertas coordenadas  $(r(0), k(0), 0)$  y que aplicamos un campo eléctrico constante en magnitud y dirección, el campo eléctrico empezará a acelerar la partícula, de manera que después de un tiempo  $t$ , el electrón tiene nuevas coordenadas  $(r(t), k(t), t) = (r(0) - vt, k(0) + eE\frac{t}{\hbar}, t)$ .

Hagamos la función de distribución tal que "siga" nuestro electrón, esto es:

$$f(r(t), k(t), t) = f(r(0), k(0), 0) \tag{3.1}$$

la ecuación anterior se relaciona con la idea de "montarse" sobre el electrón porque el afortunado viajero no percibirá cambios en la probabilidad de existencia de su montura. La ecuación 3.1 se puede escribir también como:

$$\frac{df}{dt} = 0$$

y desarrollando la derivada anterior tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= Df \cdot \frac{d}{dt}(r(t), k(t), t) \\ &= \left( \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}, \frac{\partial f}{\partial k_1}, \frac{\partial f}{\partial k_2}, \frac{\partial f}{\partial k_3}, \frac{\partial f}{\partial t} \right) \cdot \left( v_x(t), v_y(t), v_z(t), \frac{\partial k_1(t)}{\partial t}, \frac{\partial k_2(t)}{\partial t}, \frac{\partial k_3(t)}{\partial t}, 1 \right) \end{aligned}$$

Entonces

$$\frac{df}{dt} = \nabla_r f \cdot v + \nabla_k f \cdot \dot{k}(t) + \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \tag{3.2}$$

Y utilizando  $\dot{k}(t) = -\frac{eE}{\hbar}$

$$\frac{df}{dt} = \nabla_r f \cdot v - \nabla_k f \cdot \frac{eE}{\hbar} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad (3.3)$$

Sin embargo no consideramos en la ecuación anterior la posibilidad de que los electrones choquen entre ellos o contra la red de átomos. Pero esto se soluciona fácilmente añadiendo un término a la ecuación 3.3:

$$\frac{df}{dt} = \nabla_r f \cdot v - \nabla_k f \cdot \frac{eE}{\hbar} + \frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_s \quad (3.4)$$

Es decir, el término  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_s$  incluye los procesos de dispersión (scattering). Para determinar ese término se asume que su efecto es proporcional a la desviación de  $f$  respecto a  $f_0$ , es decir:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_s = -\frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(k)} \quad (3.5)$$

Dónde  $\tau(k)$  es el llamado tiempo de relajación y **NO** hay que confundirlo con la  $\tau = k_B T$ . Un caso particular de la ecuación 3.3 se da cuando  $\nabla_r f = 0$  y  $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ , este estado estacionario de no equilibrio es un buen análisis cuando se aplica un campo externo. Entonces:

$$-\frac{e}{\hbar} E \cdot \nabla_k f = -\frac{[f(k)] - f_0(k)}{\tau(k)} \quad (3.6)$$

de aquí que,

$$f(k) = f_0(k) + \frac{e}{\hbar} \tau(k) E \cdot \nabla_k f(k) \quad (3.7)$$

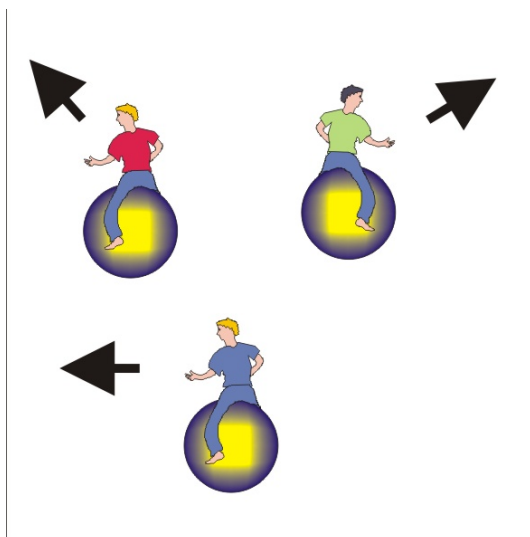


Figura 3.1:



La cual se puede aproximar mediante la ecuación:

$$f(k) = f_0(k) + \frac{e}{\hbar} \tau(k) E \cdot \nabla_k f_0(k) \quad (3.8)$$

Para calcular la conductividad eléctrica en metales podemos proceder sumando las velocidades  $v(k)$  electrónicas, es decir, sumar las velocidades de los estados  $k$  **ocupados** en la primera zona de brillouin (en una banda). Para tomar en cuenta esos estados ocupados introducimos la probabilidad de ocupación  $f(k)$ . Entonces la densidad de corriente  $\mathbf{j}_n$  está dada por

$$j = \frac{q}{8\pi^3} \int_{1st Brillouin} v(k) f(k) dk \quad (3.9)$$

Dónde  $q$  es la carga del portador, y debe llevar el signo correspondiente. Como una aproximación más podemos usar la ecuación 3.8 para calcular  $f$ . Entonces para electrones sometidos a un campo  $E_x$ :

$$j = -\frac{e}{8\pi^3} \int v(k) f(k) dk = -\frac{e}{8\pi^3} \int v(k) \left( f_0(k) + \frac{e\tau(k)}{\hbar} E_x \frac{\partial f_0}{\partial k_x} \right) dk \quad (3.10)$$

Dado que  $f_0$  es simétrica respecto a  $\mathbf{k} = 0$ , y  $v(\mathbf{k})$  es antisimétrica, la primera integral es 0. Además

$$\frac{\partial f_0}{\partial k_x} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar v(k)$$

Dónde  $E$  es la energía. Por lo tanto:

$$j = -\frac{e^2}{8\pi^3} E_x \int v^2(\mathbf{k}) \tau(k) \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (3.11)$$

En un medio isotrópico de estructura cúbica, las componentes  $y$  y  $z$  de  $j$  se hacen 0 para un campo aplicado en la dirección  $x$ , o sea  $j_y$  y  $j_z$ .

$$j_x = -\frac{e^2}{8\pi^3} E_x \int v_x^2(\mathbf{k}) \tau(k) \frac{\partial f_0}{\partial E}$$