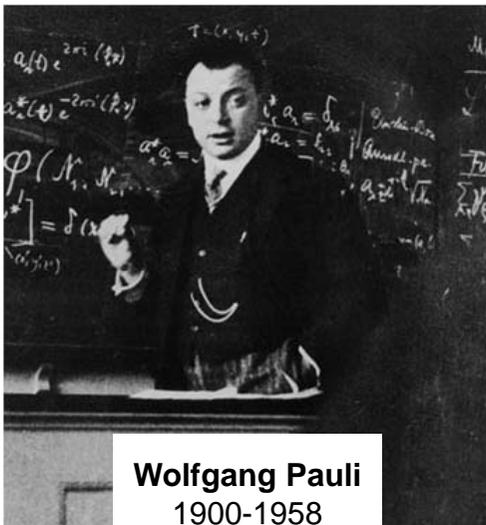


Intercambio (a)  
Ferromagnetismo

## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones **1 y 2** de dos átomos vecinos  **$i, j$** .

### Spin-statistics theorem



Fierz

Pauli

Schwinger

Feynman

El estado de un sistema de partículas idénticas de espín entero no cambia cuando dos partículas son intercambiadas: tienen estados simétricos. Las partículas con estados simétricos se llaman **bosones**.

El estado de un sistema de partículas idénticas de espín semientero cambia de signo cuando dos partículas son intercambiadas: tienen estados antisimétricos. Las partículas con estados antisimétricos se llaman **fermiones**.

## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones **1 y 2** de dos átomos vecinos ***i, j***.

Estado de dos fermiones	$\varphi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ espacial	$\chi_{ij}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ spin
----------------------------	--	---

Electrones:

$$\Psi_{ij}(1,2) = \varphi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{ij}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$$

antisimétrica

## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

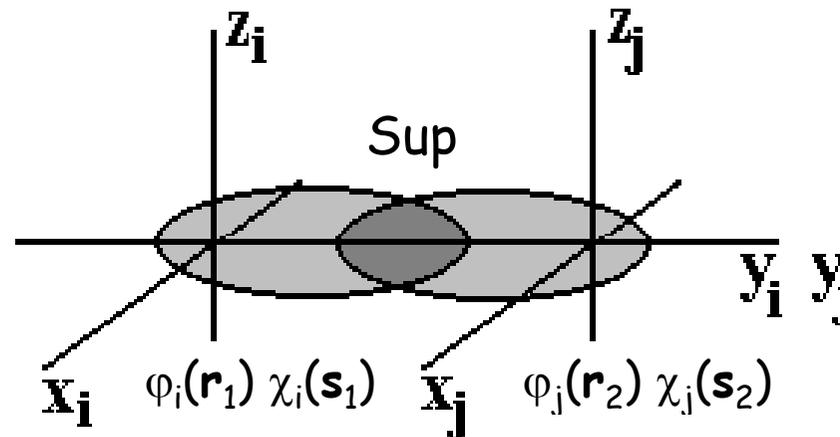
Electrones **1 y 2** de dos átomos vecinos **i,j**.

electrones  $\rightarrow \Psi_{ij}(1,2)$  antisimétrica

$$\Psi_{ij}(1,2) = \varphi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{ij}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$$

$\varphi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$   
simétrica  
 $\chi_{ij}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$   
antisimétrica

$\varphi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$   
antisimétrica  
 $\chi_{ij}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$   
simétrica



Átomos hidrogenoides

# Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones **1 y 2** de dos átomos vecinos **i,j**.

Factor de espín

$$\chi_{ij}^s = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \}$$

$$S = 0; \quad S_z = 0$$

Singlete  
(antisimétrico)

$$\chi_{ij}^t = \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [ |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle ] \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right\}$$

$$S = 1; \quad S_z = 1$$

$$S = 1; \quad S_z = 0$$

$$S = 1; \quad S_z = -1$$

Triplete  
(simétrico)

Factor espacial

$$\varphi_{ij}^s = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_j(\vec{r}_2) + \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_j(\vec{r}_1) \}$$

(simétrico)

$$\varphi_{ij}^t = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_j(\vec{r}_2) - \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_j(\vec{r}_1) \}$$

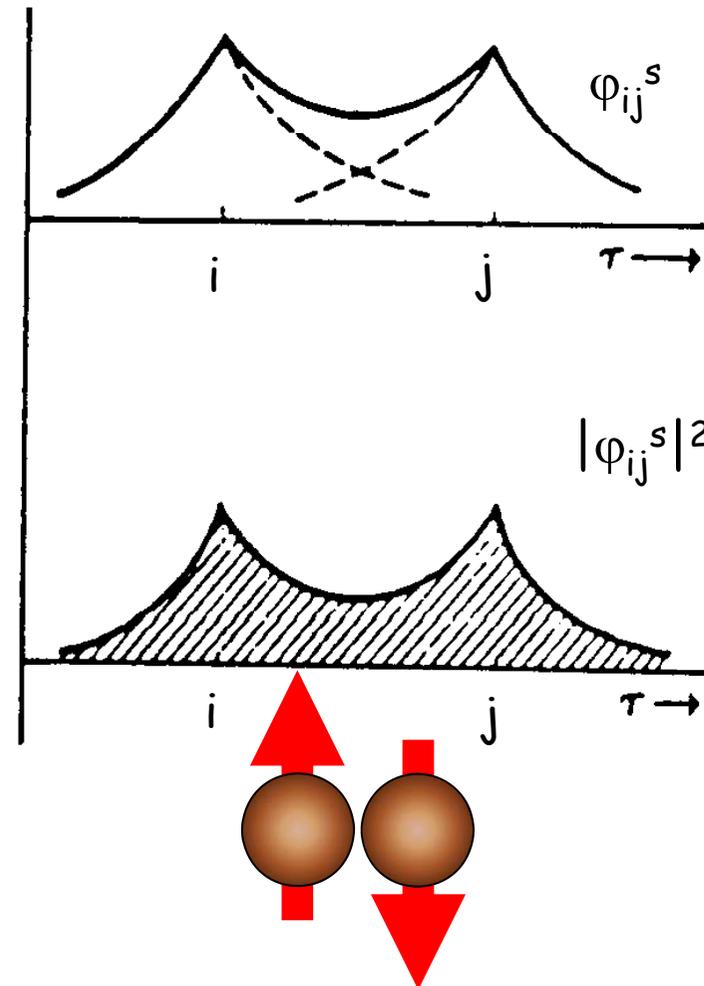
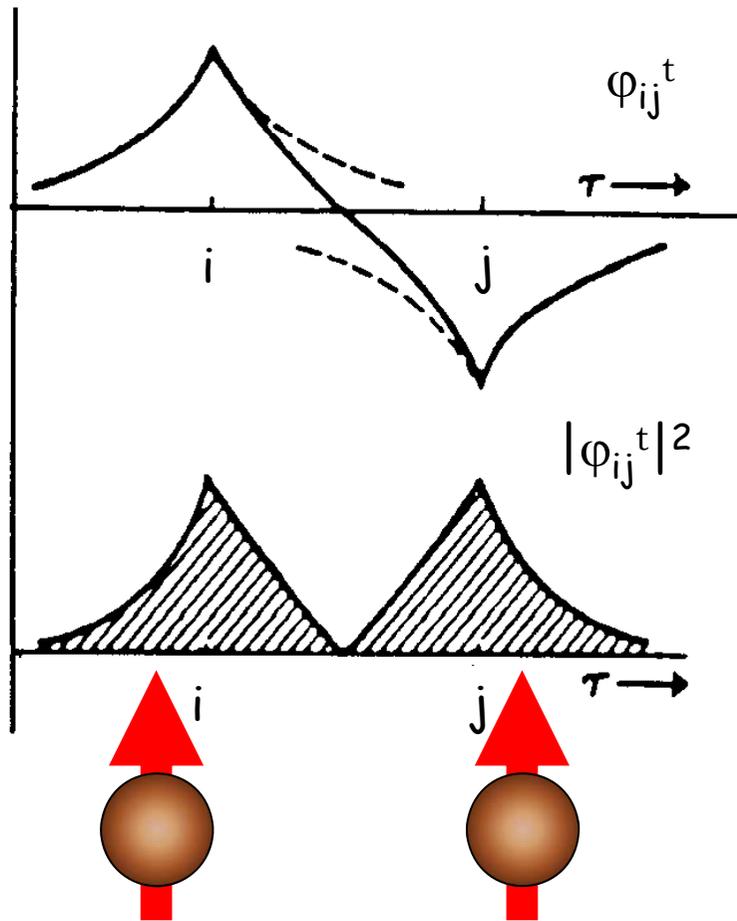
(antisimétrico)

# Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

$$\varphi_{ij}^t = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) - \varphi_i(\vec{r}_2) \varphi_j(\vec{r}_1) \}$$

$$\varphi_{ij}^s = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) + \varphi_i(\vec{r}_2) \varphi_j(\vec{r}_1) \}$$



## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

Evaluación de la energía potencial

$$U = \alpha \left( \frac{1}{r_{ij}} - \frac{1}{r_{i1}} - \frac{1}{r_{i2}} - \frac{1}{r_{j1}} - \frac{1}{r_{j2}} + \frac{1}{r_{12}} \right)$$

Valor esperado de  $U$

$$E_S = \langle U \rangle_S = \langle \varphi_{ij} | U | \varphi_{ij} \rangle = \int \varphi_{ij}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) U \varphi_{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2$$

*todo el espacio*

## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

en el estado singlete:  $(\text{llamamos } \varphi_i(\vec{r}_1) = \varphi_{i1})$

$$E_s = \langle U \rangle_s = \int_{\text{todo el espacio}} \varphi_{ij}^{s*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) U \varphi_{ij}^s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2$$

$$E_s = \frac{1}{2} \int (\varphi_{i1}^* \varphi_{j2}^* + \varphi_{i2}^* \varphi_{j1}^*) U (\varphi_{i1} \varphi_{j2} + \varphi_{i2} \varphi_{j1}) dV_1 dV_2$$

$$E_s = \left( \int \varphi_{i1}^* \varphi_{j2}^* U \varphi_{i1} \varphi_{j2} dV_1 dV_2 + \int \varphi_{i1}^* \varphi_{j2}^* U \varphi_{i2} \varphi_{j1} dV_1 dV_2 \right)$$

$$K_{ij}$$

$$J_{ij}$$

$$E_s = K_{ij} + J_{ij}$$

## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

en el estado triplete:

$$E_t = \langle U \rangle_t = \int_{\text{todo el espacio}} \varphi_{ij}^{t*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) U \varphi_{ij}^t(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dV_1 dV_2$$

$$E_t = \frac{1}{2} \int (\varphi_{i1}^* \varphi_{j2}^* - \varphi_{i2}^* \varphi_{j1}^*) U (\varphi_{i1} \varphi_{j2} - \varphi_{i2} \varphi_{j1}) dV_1 dV_2$$

$$E_t = \left( \int \varphi_{i1}^* \varphi_{j2}^* U \varphi_{i1} \varphi_{j2} dV_1 dV_2 - \int \varphi_{i1}^* \varphi_{j2}^* U \varphi_{i2} \varphi_{j1} dV_1 dV_2 \right)$$

$\boxed{K_{ij}}$   $\boxed{J_{ij}}$

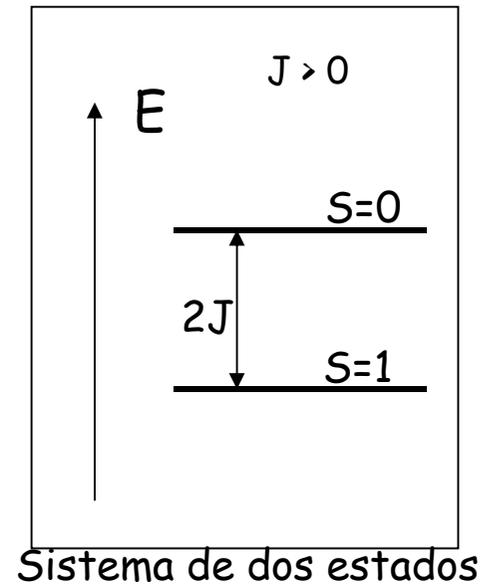
$$E_t = K_{ij} - J_{ij}$$

## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

diferencia de energía entre ambos estados:

$$E_s - E_t = E(s = 0) - E(s = 1) = 2J_{ij}$$



## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

Construcción del operador Hamiltoniano de espín

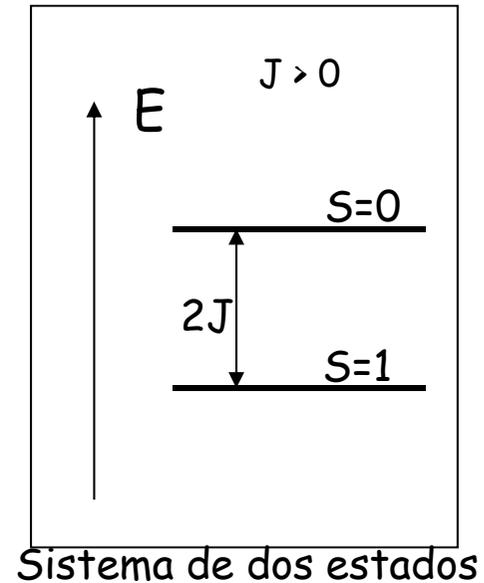
$\vec{s}_i$ , espín del electrón  $i$      $\vec{s}_j$ , espín del electrón  $j$

$\vec{S} = \vec{s}_i + \vec{s}_j$ , espín suma

$$S^2 = (\vec{s}_i + \vec{s}_j)^2 = s_i^2 + 2\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j + s_j^2$$

$$\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = \frac{1}{2} \left[ (\vec{s}_i + \vec{s}_j)^2 - s_i^2 - s_j^2 \right]$$

$$\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = \frac{S^2}{2} - s^2$$



# Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

Operador Hamiltoniano de espín

$$\langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle = \frac{S(S+1)}{2} - s(s+1)$$

$S = 0$

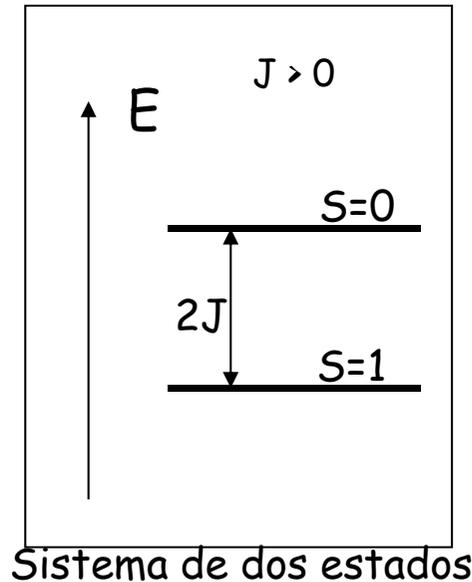
$S = 1$

$$\langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle^s = -\frac{3}{4} \quad \langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle^t = +\frac{1}{4}$$

diferencia de  $\langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle$  entre ambos estados:

$$\langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle^s - \langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle^t = -1$$

$S = 0 \quad S = 1$



## Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

### Operador Hamiltoniano de espín

definiendo:

$$\mathcal{H}_{spin} = Cte \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$$

y requiriendo:

$$\langle \mathcal{H}_{spin} \rangle_s - \langle \mathcal{H}_{spin} \rangle_t = 2J_{ij}$$

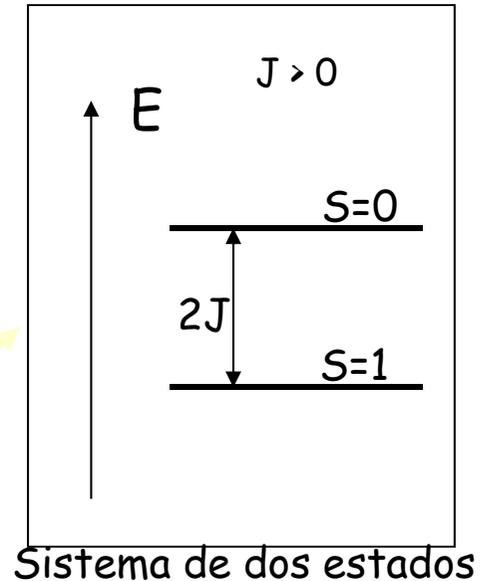


$$Cte = -J_{ij}$$

Obtenemos el Hamiltoniano de Heisemberg

$$\mathcal{H}_{spin} = -2J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$$

que reproduce



Valor típico de  $J$  en materiales con elementos 3d (Cr, Mn, Fe, Co Ni)

$$J_{ij} \approx 10^{-21} \text{ Joules}$$

Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos  $i, j$ .

Alcance espacial de la interacción de intercambio

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)F(\phi)$$

Función de onda electrónica

$$R_{n,l}(r) = r^l L_{n,l} e^{-r/na_0}$$

Polinomio de Laguerre (át. H)

$$J(r) \approx e^{-\alpha r}$$

Interacción de corto alcance

Orden magnético de corto alcance. Interacción de intercambio

Electrones 1 y 2 de dos átomos vecinos i,j.

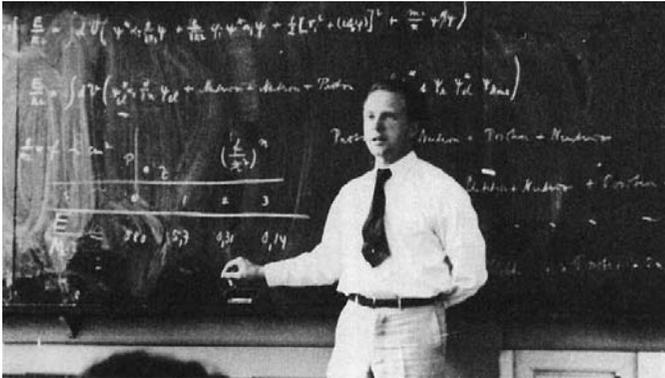
Operador Hamiltoniano de espín



Paul Dirac (1902 - 1984)

Hamiltoniano de Heisemberg

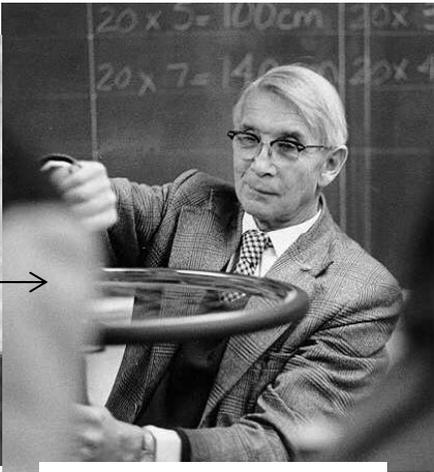
$$\mathcal{H}_H = -2J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$



Werner Heisenberg (1901 - 1976)



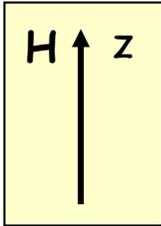
Wilhelm Lenz (1888 - 1957)



Ernst Ising (1900 - 1998)

Hamiltoniano de Ising

$$\mathcal{H}_I = -2J_{ij} S_{iz} S_{jz}$$



Empleo muy difundido en física y otras áreas del conocimiento

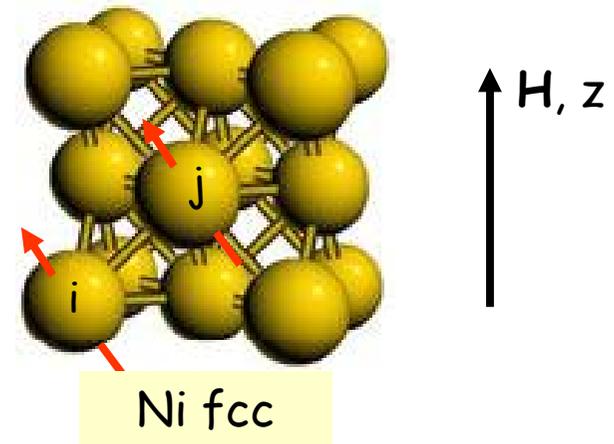
# Ferromagnetismo

Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

Consideramos dos contribuciones a la energía

$$E = - \sum_{ij} \overset{\text{intercambio}}{J_{ij}} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \sum_i \overset{\text{Zeeman}}{\mu_0 g \mu_B} \vec{s}_i \cdot \vec{H}$$

$J_{ij} > 0 \Rightarrow$  ferromagnetismo



Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

(1) Aproximamos los espines vecinos  $\mathbf{s}_j$  a cada spin de la red  $\mathbf{s}_i$  por su valor esperado  $\langle \mathbf{s}_j \rangle$  y definimos el campo "molecular" de Weiss  $H_w$

$$E_i = -2 \sum_j J_{ij} \vec{s}_i \cdot \langle \vec{s}_j \rangle - \mu_0 g \mu_B \vec{s}_i \cdot \vec{H} = -\mu_0 g \mu_B \vec{s}_i \cdot \vec{H}_{ef}^i$$

$$\vec{H}_{ef}^i = \frac{2}{\mu_0 g \mu_B} \sum_j J_{ij} \langle \vec{s}_j \rangle + \vec{H} = \vec{H}_w^i + \vec{H}$$

campo "molecular" de Weiss  $H_w$

$$\vec{H}_w^i = \frac{2pJ \langle s_z \rangle}{\mu_0 g \mu_B} \vec{u}_z \left\{ \begin{array}{l} \approx 6.4 \times 10^8 \text{ A/m} \\ \approx 800 \text{ Tesla} \end{array} \right.$$



Pierre Weiss (1865-1940)

Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

$$E_i = -\mu_0 g \mu_B \vec{s}_i \cdot \vec{H}_{ef}^i = -\mu_0 \vec{m}_i \cdot \vec{H}_{ef}^i$$

idéntica a la expresión tratada para el paramagnetismo de momentos localizados

(2) segunda aproximación:

$$\left( \mathcal{H} = -\vec{m} \cdot \vec{B} = -\mu_0 \vec{m} \cdot \vec{H} = -\mu_0 m_z H \right)$$

$$\langle \vec{s}_i \rangle \approx \langle s_{iz} \rangle = \langle s_{jz} \rangle = \langle s_z \rangle$$

$$\frac{\langle m_z \rangle}{m} = \frac{\langle s_z \rangle}{s} = B_s(x) \quad x = \frac{\mu_0 g \mu_B s H_{ef}}{kT}$$

$$B_s(x) = \frac{2s+1}{2s} \coth\left(\frac{2s+1}{2s} x\right) - \frac{1}{2s} \coth\left(\frac{x}{2s}\right)$$

s momento angular total

Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

$$B_s(x) = \frac{2s+1}{2s} \coth\left(\frac{2s+1}{2s}x\right) - \frac{1}{2s} \coth\left(\frac{x}{2s}\right)$$

Teniendo en cuenta que

$$x = \frac{\mu_0 g \mu_B s H_{ef}}{kT} \quad \vec{H}_{ef} = \frac{2}{\mu_0 g \mu_B} \sum_j J_{ij} \langle \vec{s}_z \rangle + \vec{H}$$

Obtenemos:

$$\langle s_z \rangle = s B_s \left( \frac{\mu_0 g \mu_B s H_{ef}}{kT} \right) = s B_s \left( \frac{s}{kT} \left[ \mu_0 g \mu_B H + 2 \langle s_z \rangle \sum_j J_{ij} \right] \right)$$

Solución formal

Ecuación trascendente.

La incógnita  $\langle S_z \rangle$  no puede resolverse analíticamente.

Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

Solución formal

$$\langle s_z \rangle = sB_s \left( \frac{\mu_0 g \mu_B s H_{ef}}{kT} \right) = sB_s \left( \frac{s}{kT} \left[ \mu_0 g \mu_B H + 2 \langle s_z \rangle \sum_j J_{ij} \right] \right)$$

(3) tercera aproximación:

$$J_{ij} = J \neq 0$$

Sólo para los  $p$  primeros vecinos  $j$

$$\langle s_z \rangle = sB_s \left( \frac{s}{kT} \left[ \mu_0 g \mu_B H + 2pJ \langle s_z \rangle \right] \right)$$

Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

$$\langle s_z \rangle = sB_s \left( \frac{s}{kT} [\mu_0 g \mu_B H + 2pJ \langle s_z \rangle] \right)$$

Simplificando la notación

$$\zeta = B_s (x + \alpha \zeta) \quad \zeta = \frac{\langle s_z \rangle}{s} \quad x = \frac{\mu_0 g \mu_B s H}{kT} \quad \alpha = \frac{2s^2 p J}{kT}$$

Ecuación trascendente

# Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

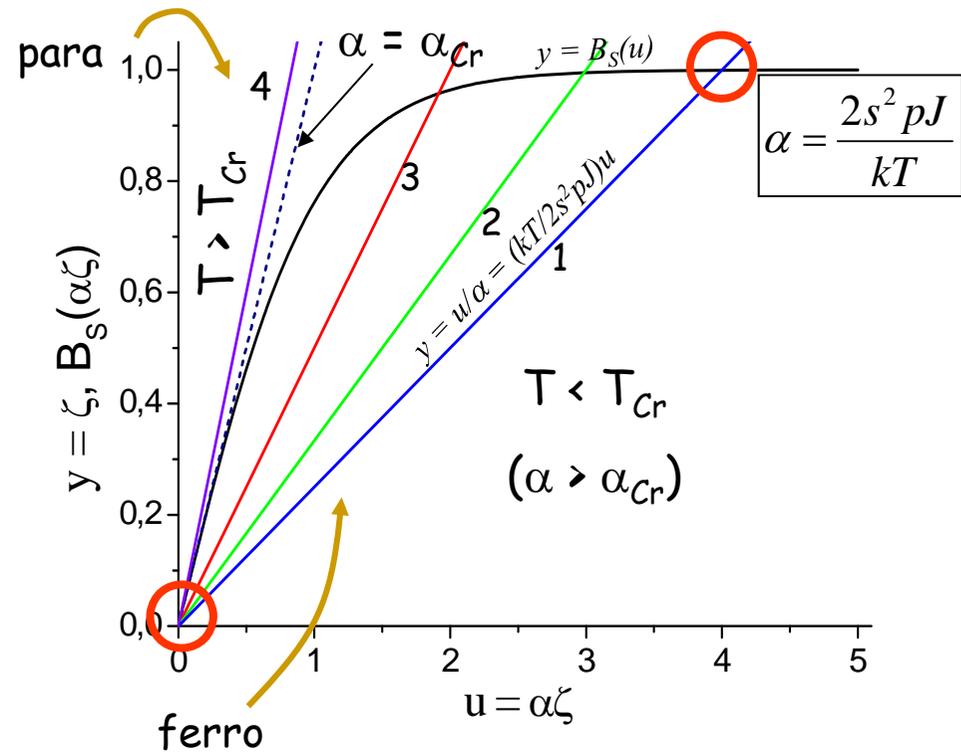
Caso  $H = 0 \Rightarrow x = 0$

Solución gráfica

$$\zeta = B_s(\alpha\zeta) \begin{cases} y = \zeta \\ y = B_s(\alpha\zeta) \end{cases}$$

Condición crítica

Pendiente Brillouin  $\frac{s+1}{3s} = 1/\alpha$  Pendiente recta



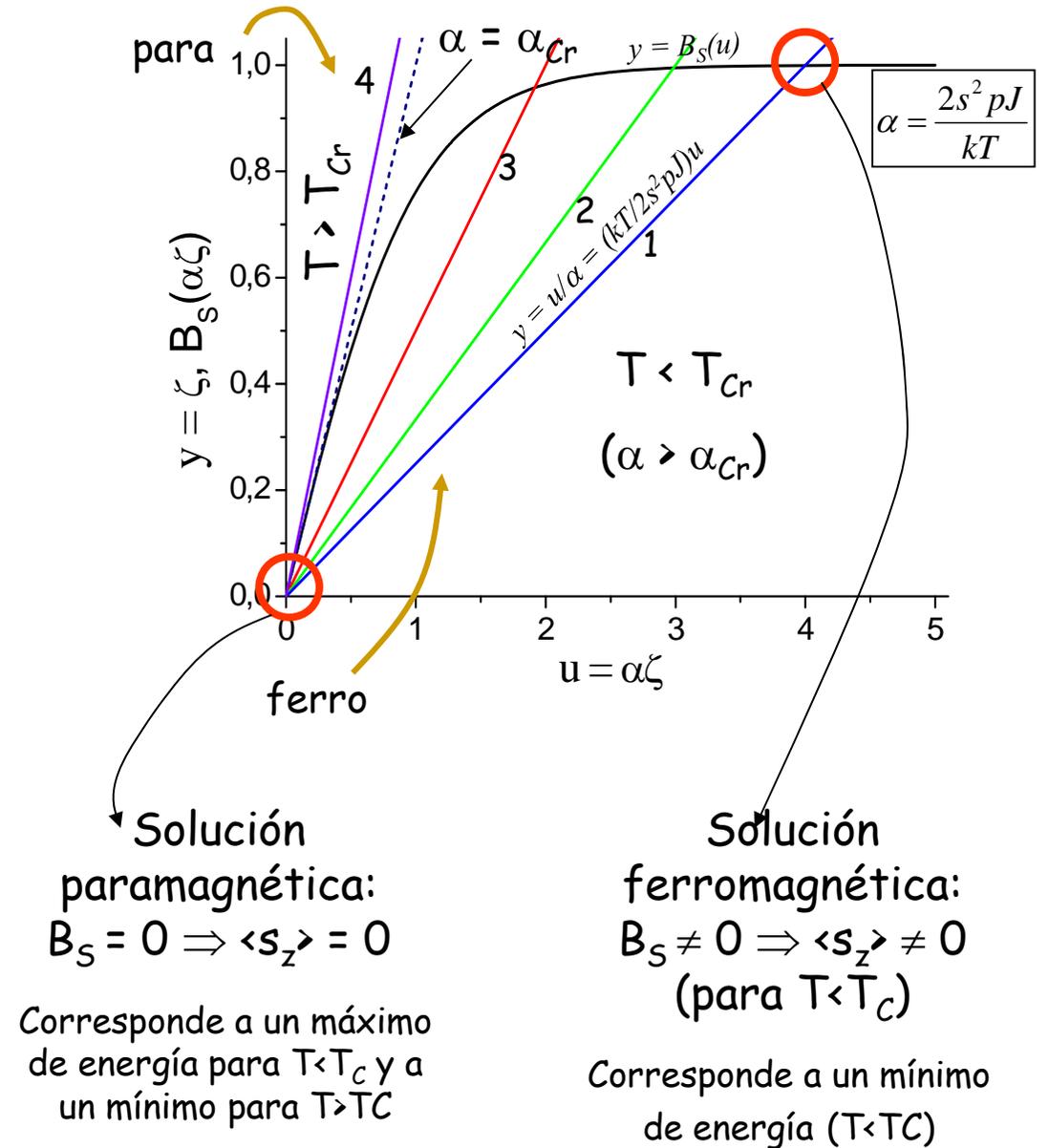
Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

Caso  $H = 0 \Rightarrow x = 0$

de la condición crítica

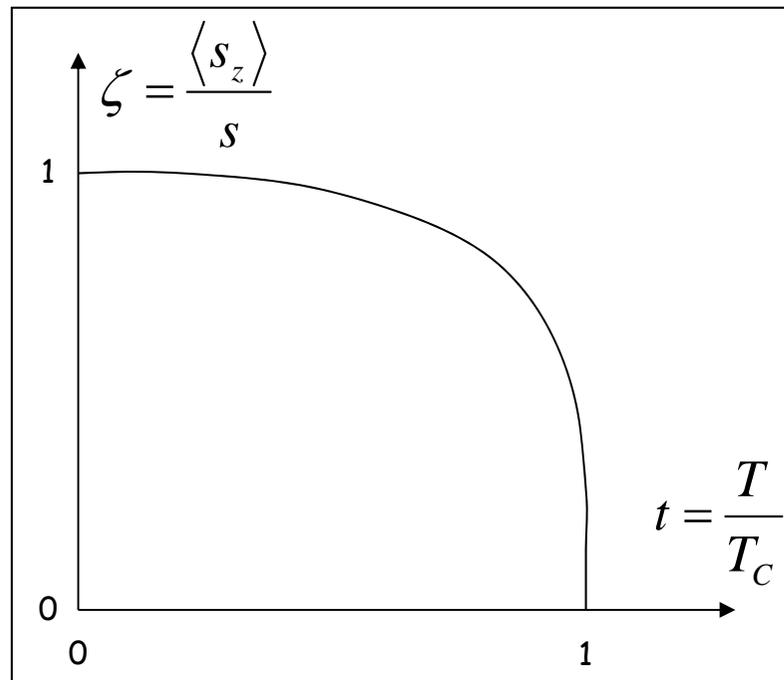
$$\alpha_{cr} = \frac{2s^2 pJ}{kT_c}$$

$$T_c = \frac{2pJs(s+1)}{3k}$$



Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

$$T_c = \frac{2pJs(s+1)}{3k}$$



Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

$$T_c = \frac{2pJs(s+1)}{3k}$$

Temperaturas de Curie

Material	Curie temperature (K)
Fe	1043
Co	1388
Ni	627
Gd	293
Dy	85
CrBr <sub>3</sub>	37
Au <sub>2</sub> MnAl	200
Cu <sub>2</sub> MnAl	630
Cu <sub>2</sub> MnIn	500
EuO	77
EuS	16.5
MnAs	318
MnBi	670
GdCl <sub>3</sub>	2.2
Fe <sub>2</sub> B	1015
MnB	578

Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

Ejemplo: estimación del spin  $s$  y la integral de intercambio  $J$  para el Fe bcc ( $\alpha$ )

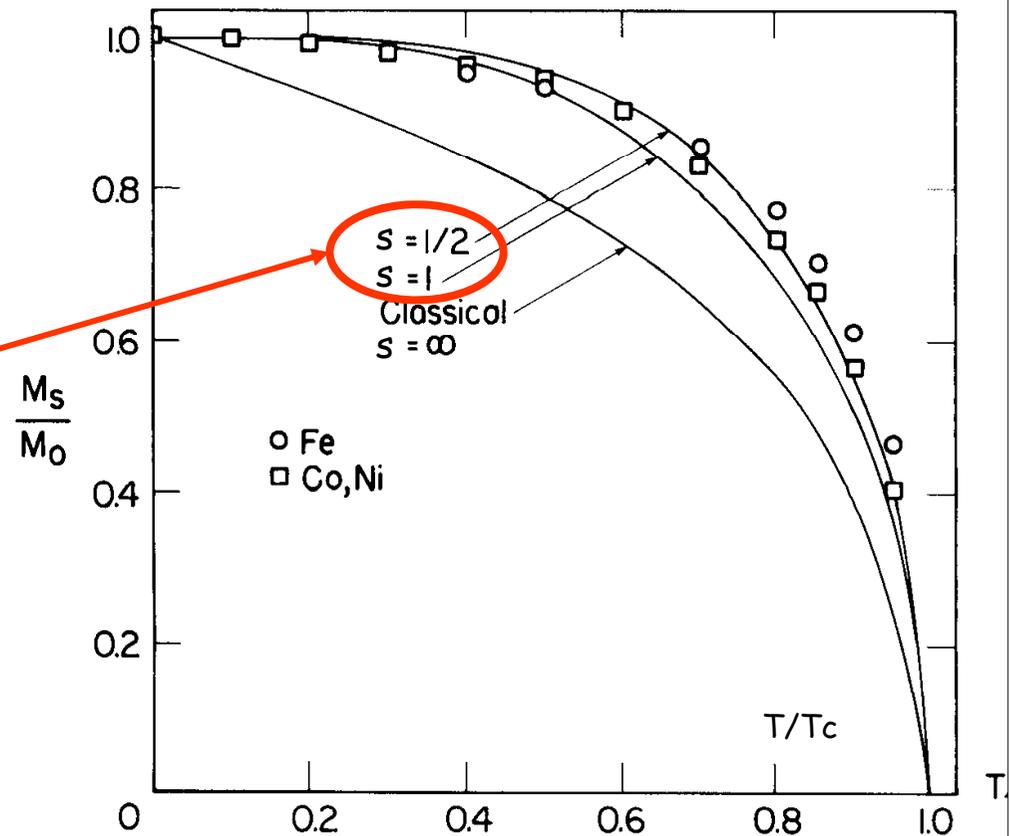
$$T_c = \frac{2pJs(s+1)}{3k}$$

$$J = \frac{3kT_c}{2ps(s+1)}$$

(1)  $s_{Fe}?$

(1a)  $M_s$  vs  $T$

$$s_{Fe} = \frac{1}{2} \text{ ó } s_{Fe} = 1$$



Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

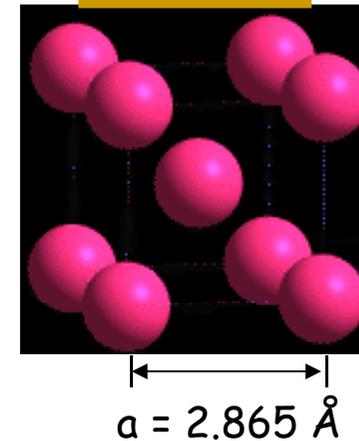
Ejemplo: estimación del spin  $s$  y la integral de intercambio  $J$  para el Fe bcc ( $\alpha$ )

$s_{Fe}?$

(1b) valor de  $M_S$  a 0 K

$M_S = 2.198 \text{ Tesla}$

bcc-Fe



$$M_S = \frac{m}{V} = \frac{m_{at}}{V_{at}} \Rightarrow m_{at} = M_S V_{at}$$

$$m_{at} = M_S \frac{V_{cel}}{2} = M_S \times \frac{a^3}{2} = \frac{2.198}{4\pi \times 10^{-7}} \left( \frac{A}{m} \right) \times \frac{(2.865)^3}{2} \times 10^{-30} m^3 = 2.065 \times 10^{-23} Am^2 = 2.23 \mu_B$$

$$m_{at} = g s_{Fe} \mu_B = 2 s_{Fe} \mu_B$$

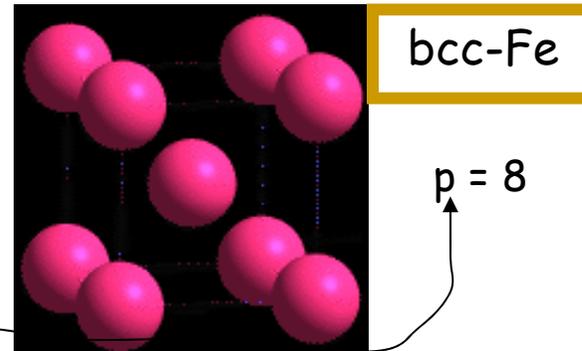
$s_{Fe} \approx 1.115$

Análisis simple del Ferromagnetismo. Teoría del campo molecular para electrones localizados en un sólido elemental.

Ejemplo: estimación de la integral de intercambio para el Fe bcc ( $\alpha$ )

$$J = \frac{3kT_C}{2ps(s+1)}$$

$\xrightarrow{1043K}$   
 $\xrightarrow{1.115}$



$$J_{\alpha-Fe} \approx \frac{3 \times 1.38 \times 10^{-23} \text{ (Joule / K)} \times 1043 \text{ K}}{2 \times 8 \times 1.115 \times 2.115} = 1.21 \times 10^{-21} \text{ Joule}$$

$J_{\alpha-Fe} \approx 1.21 \times 10^{-21} \text{ Joule}$

