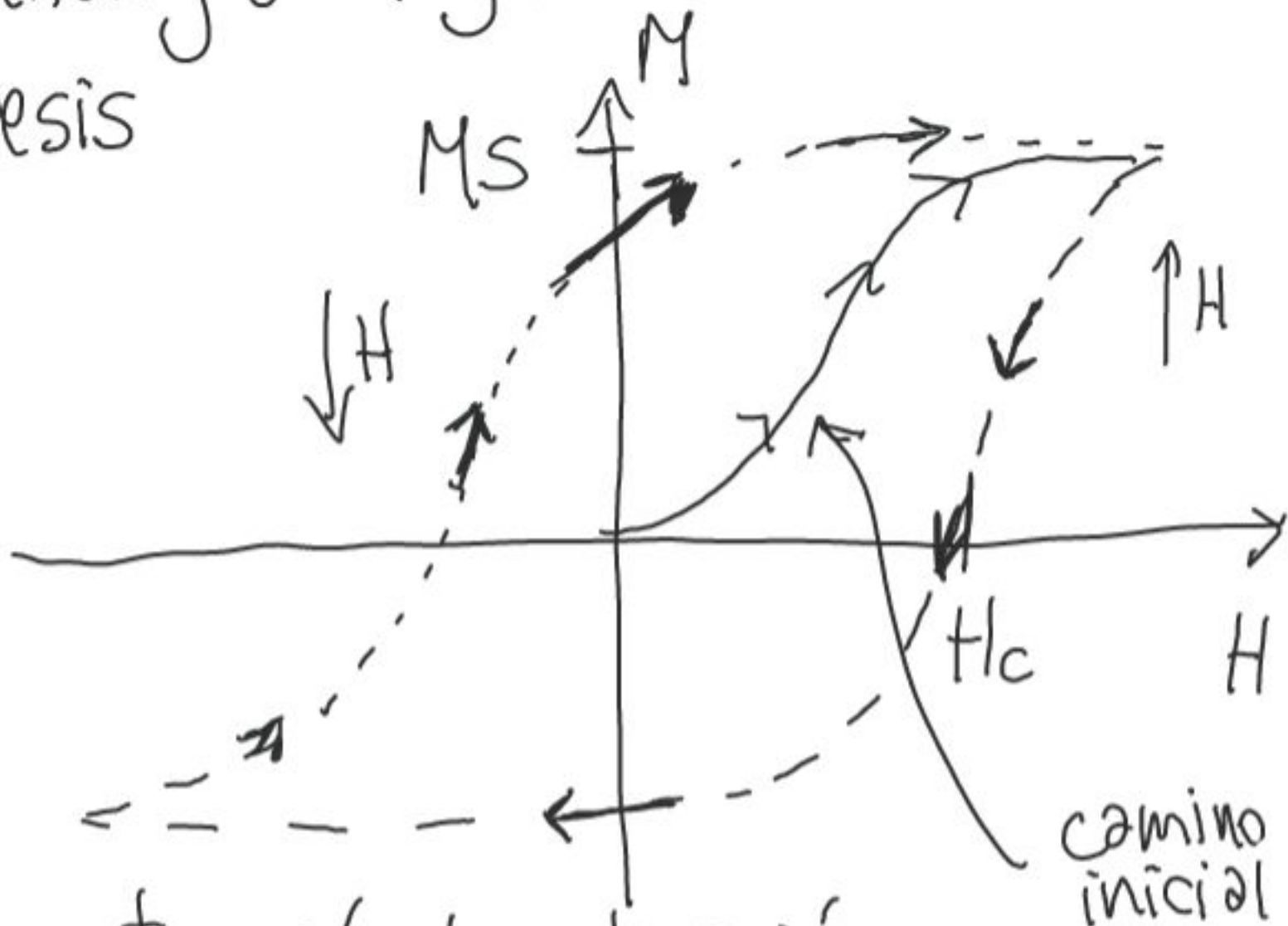


# Ferromagnetismo

Fenomenología: magnetización remanente a  $H=0$ .

Histéresis

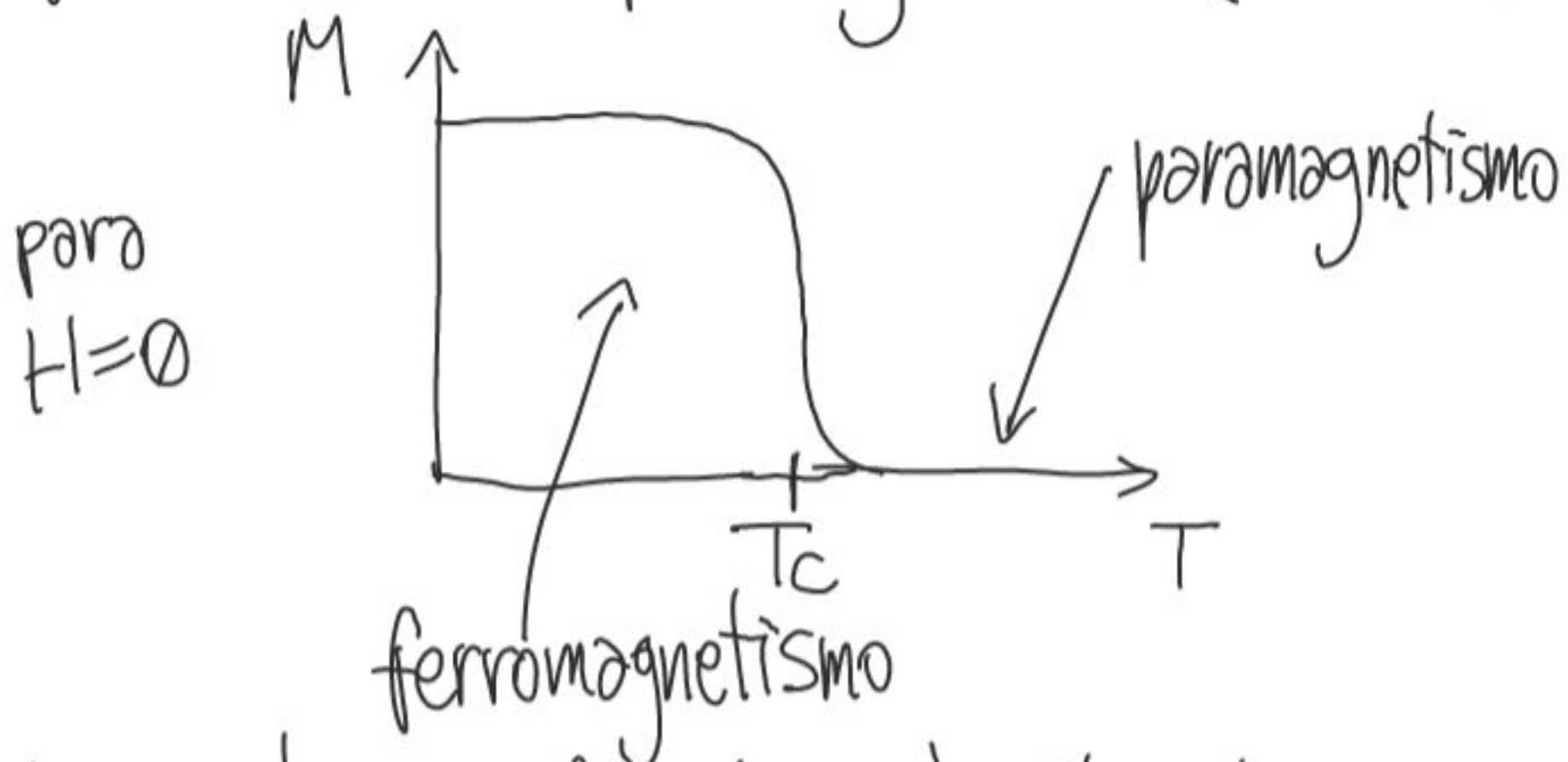


$M_s$ : magnetización de saturación

$H_c$ : campo coercitivo

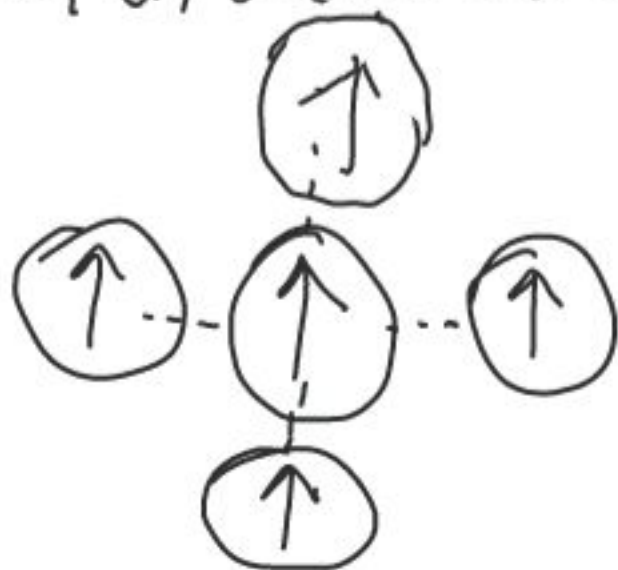
La magnetización en función del campo aplicado depende fuertemente de la "historia" del material. Materiales de alto  $H_c$  son utilizados para imanes permanentes: se necesita un campo muy intenso para revertir la magnetización una vez ésta es saturada ( $|\vec{M}| = M_s$ ) en una dirección dada.

Las propiedades ferromagnéticas se pierden por sobre una temperatura crítica  $T_c$ , para  $T > T_c$  el comportamiento es paramagnético ( $\vec{M} \parallel \vec{H}$ ).



A temperaturas suficientemente altas ( $T > T_c$ ) los spines actúan independientemente.

¿Cómo se explica la fase ferromagnética? Debe existir una interacción entre spines en distintos sitios de la red, de manera de mantenerlos alineados en la misma dirección en ausencia de campo  $H$ :



La interacción que conduce a este orden se denomina interacción de intercambio (exchange), y se modela utilizando un hamiltoniano de Heisenberg:

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = -2J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

para dos sitios con spines  $\vec{S}_1$  y  $\vec{S}_2$ .  $J$  es la constante de intercambio, de tal manera que, "clásicamente",

$$\left. \begin{aligned} E(\uparrow, \uparrow) &= E(\downarrow, \downarrow) = -J/2 \\ E(\uparrow, \downarrow) &= E(\downarrow, \uparrow) = +J/2 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{para} \\ \text{spin } 1/2 \end{array}$$

y la diferencia en energía entre spines paralelos y antiparalelos es justamente  $\Delta E = J$ .

Esta interacción actúa sobre primeros vecinos, y en general

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \sum_{\langle j \neq i \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

El origen de la interacción de intercambio es puramente cuántico: se origina en la antisimetría ante intercambios de dos fermiones que presenta la función de onda (fermiónica) y en la presencia de la repulsión electrostática.

Si fijamos el spin total  $S$  en un sistema de 2 electrones, existe un estado con  $S=0$  (estado "singlete") y 3 estados con  $S=1$  (estados "triplete") ya que la degeneración es  $2S+1$ . Estos son:

$$S=0 \quad \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \right.$$

$$S=1 \quad \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right.$$

Notemos que los estados triplete son simétricos, mientras que el estado singlete es antisimétrico.

Esto significa que la parte espacial de la función de onda total para los dos electrones tendrá que ser:

- simétrica para el estado singlete
- antisimétrica para los estados triplete

Esto puede conseguirse planteando:

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)) \chi_S$$

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) - \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)) \chi_T$$

donde  $\psi_1, \psi_2$  son las funciones de onda espaciales  
 $\chi_S, \chi_T$  : funciones de onda de spin

Las energías de los estados singlete y triplete son:

$$E_S = \int dr_1 dr_2 \psi_S^* \hat{H} \psi_S$$

$$E_T = \int dr_1 dr_2 \psi_T^* \hat{H} \psi_T$$

y su diferencia puede escribirse como:

$$E_S - E_T = 2 \int dr_1 dr_2 \psi_1(r_1)^* \psi_2(r_2)^* \mathcal{H} \psi_1(r_2) \psi_2(r_1)$$

(usando que  $\chi_S$  y  $\chi_T$  son normalizados).

Ahora, quisiéramos expresar esta diferencia en términos de un operador de spin que combine  $\check{S}_1$  y  $\check{S}_2$ . Sabemos que

$$(\check{S}_1 + \check{S}_2)^2 \text{ tiene autovalor } S(S+1)$$

$$\text{y tanto } \check{S}_1^2 \text{ como } \check{S}_2^2 \text{ tienen autovalor } \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) = \frac{3}{4}$$

$$\text{Luego, } (\check{S}_1 + \check{S}_2)^2 = \check{S}_1^2 + \check{S}_2^2 + 2\check{S}_1 \cdot \check{S}_2 \text{ implica que}$$

$$\check{S}_1 \cdot \check{S}_2 \text{ tiene autovalor } -\frac{3}{4} \text{ (singlete)}$$

$$\frac{1}{2} \left( S(S+1) - \frac{6}{4} \right) \begin{matrix} \nearrow \\ \searrow \end{matrix} \begin{matrix} -\frac{3}{4} \text{ (singlete)} \\ \frac{1}{4} \text{ (triplete)} \end{matrix}$$

Luego podemos construir un hamiltoniano efectivo

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{1}{4} (E_S + 3E_T) - (E_S - E_T) \check{S}_1 \cdot \check{S}_2$$

con autovalores  $E_S$  y  $E_T$  para singlete y triplete, respectivamente.

$\check{H}$  tiene entonces un término constante y otro dependiente del spin de los electrones. Podemos olvidar el término constante, y definir un  $\check{H}_{\text{spin}}$  como

$$\check{H}_{\text{spin}} = -2J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

con  $J = \frac{E_S - E_T}{2} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_2^*(\mathbf{r}_2) \check{H} \cdot \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1)}{\psi_2(\mathbf{r}_1)}$ .

A esta integral se le conoce como la integral de intercambio, y depende de las interacciones entre sitios (contenidas en  $\check{H}$ ) que no son de spin, por ej. la interacción electrostática entre los dos electrones.

Si  $J > 0$ , se favorece el estado triplete ( $s=1$ ).  
 Si  $J < 0$ , se favorece el estado singlete ( $s=0$ ).

Luego, nuestro modelo para el ferromagnetismo será

$$\check{H} = -\sum_{i, \langle j \neq i \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{H}$$

Este modelo puede resolverse en una aproximación de "campo medio" (mean field), definiendo un campo magnético local

$$\check{H}_{\text{medio}}^{(i)} \equiv -\frac{z}{g\mu_B} \sum_{\langle j \rangle} J_{ij} \check{S}_j$$

$$\begin{aligned} \text{Luego } \check{H} &= \sum_{i=1}^N \left( g\mu_B \check{S}_i \cdot \check{H}_{\text{medio}}^{(i)} + g\mu_B \check{S}_i \cdot \check{H} \right) \\ &= g\mu_B \sum_{i=1}^N \check{S}_i \cdot \left( \check{H} + \check{H}_{\text{medio}}^{(i)} \right) \end{aligned}$$

de manera análoga a un paramagneto con campo externo dependiente del sitio. Este campo medio mide el orden local, y es razonable asumirlo como proporcional a  $M$ :  $\check{H}_{\text{medio}}^{(i)} = \lambda \check{M}$  ( $\lambda > 0$ ).

Esto implica que si el sistema está ordenado, cada spin querrá permanecer alineado con la dirección de  $\check{M}$  y así se preserva el orden ferromagnético hasta  $T \approx T_c$ , aún en ausencia de  $\check{H}$  externo.



Para ir más allá, el problema debe tratarse de manera autoconsistente, ya que

$$\vec{M} \rightarrow \vec{H}_{\text{medio}}^{(i)} \rightarrow \vec{M} \rightarrow \dots$$

A este modelo se le conoce como modelo de Curie-Weiss. Para el caso de paramagnetismo de Curie teníamos

$$M = M_s \cdot B_J \left( \frac{g\mu_B J H}{k_B T} \right)$$

pero ahora  $H \rightarrow H + \lambda M$ , así que tenemos un sistema de ecuaciones:

$$M = M_s \cdot B_J (Y) \quad (1)$$

$$Y = \frac{g\mu_B J (H + \lambda M)}{k_B T} \quad (2)$$

Para alta  $T$ , sólo hay solución para  $M=0$ , mientras que para baja  $T$ ,  $M \approx M_s$  aún para el caso  $H=0$ .

Existe entonces magnetización espontánea, donde cualquier fluctuación decide la dirección en que se alinearán los Spines.

Para  $T$  alta,  $B_J(\gamma) \approx \frac{J+1}{3J} \gamma$ , luego

$$M \approx M_s \cdot \frac{J+1}{3J} \frac{g\mu_B J}{k_B T} (H + \lambda M)$$

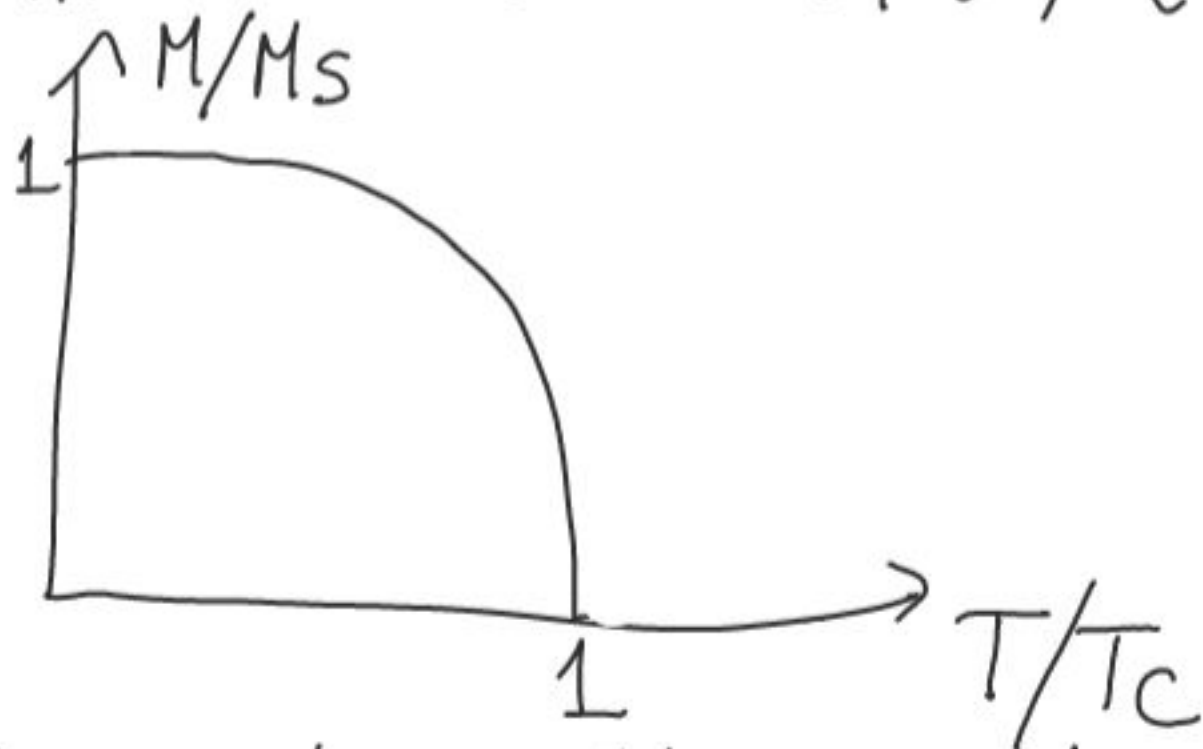
A campo  $H=0$ ,  $M \approx M_s \cdot \frac{J+1}{3} g\mu_B \cdot \frac{\lambda M}{k_B T}$

y esto es válido con  $M \neq 0$  hasta  $T = T_c$ , luego

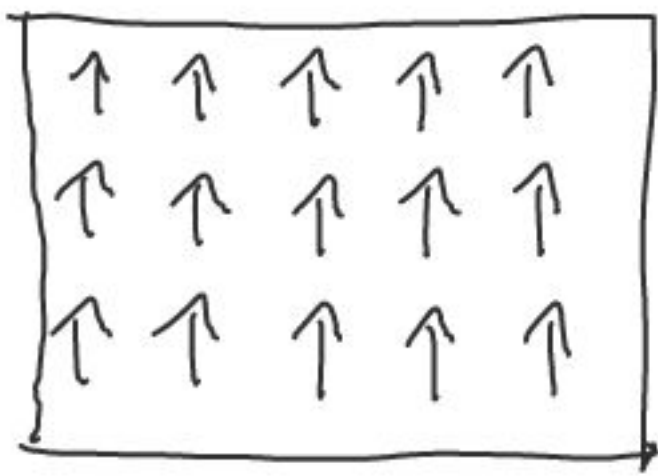
$$T_c \approx \frac{J+1}{3k_B} g\mu_B \lambda M_s$$

Ej: para hierro (Fe),  $g = 2.22$  y  $T_c = 1043\text{K}$

Resolviendo numéricamente (1) y (2), se obtiene:



Dado que  $M$  es continua, ésta es una transición de segundo orden.

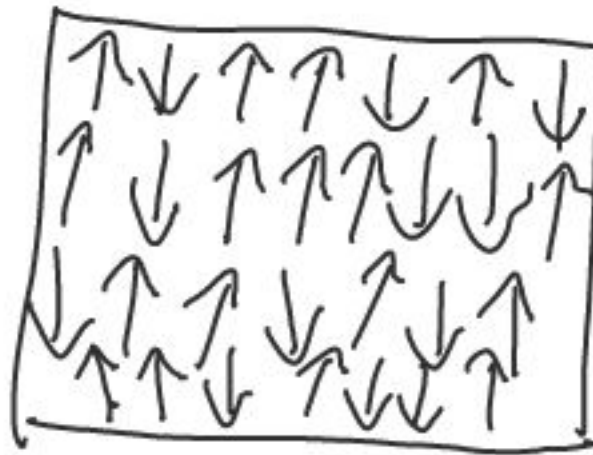


$T = 0$



$T > 0$

dominios magnéticos



$T > T_c$

Si el spin no necesariamente toma los valores "arriba" y "abajo", entonces lo más favorable energéticamente es formar una "pared de dominio":



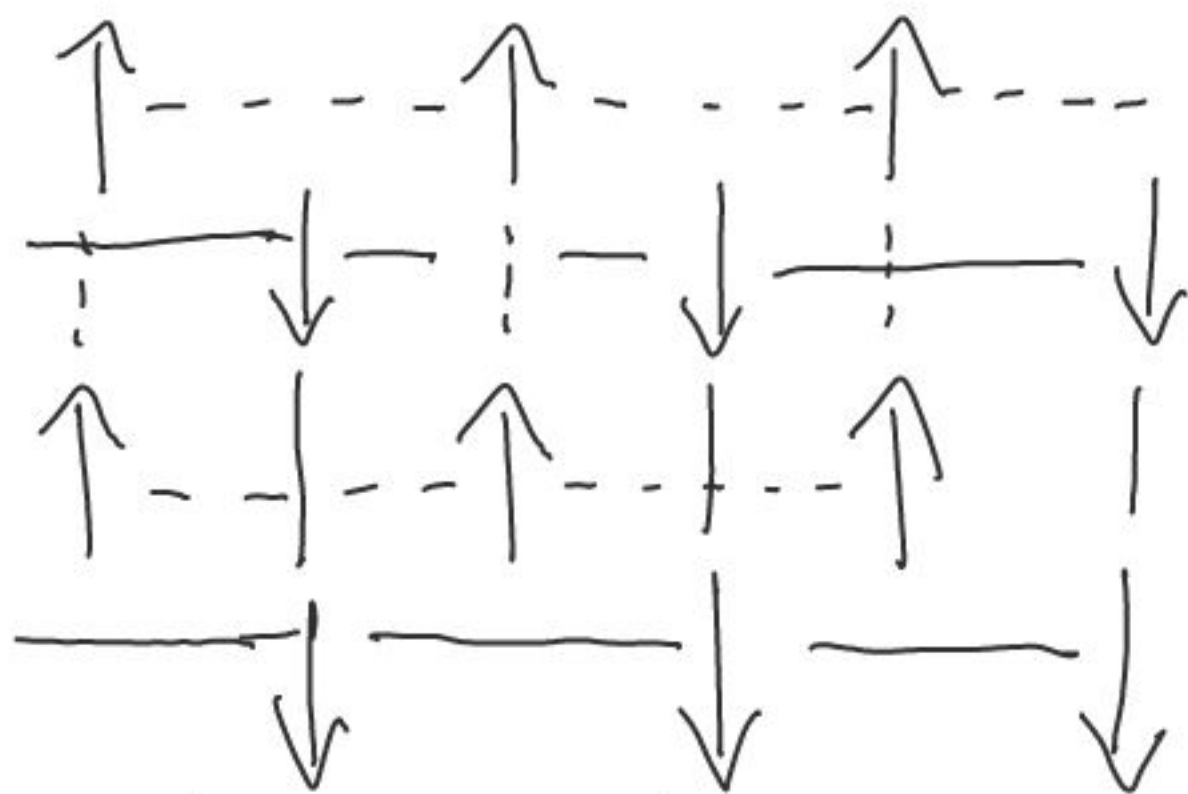
muy costoso en energía!



la pared de dominio "suaviza" el cambio de  $\uparrow$  a  $\downarrow$

# Antiferromagnetismo ( $J < 0$ )

Sitios vecinos tienen spines opuestos. Típicamente puede verse como 2 redes ferromagnéticas intercaladas:



La magnetización neta es cero, a pesar de existir orden. Se define un parámetro de orden

$$M' \equiv M_+ - M_-$$

donde  $M_{\pm}$  es la magnetización de la subred ↑ o ↓. Para usar el modelo de Curie-Weiss,

$$H_{\text{medio}\pm}^{(i)} \equiv -\lambda / M_{\mp} \quad (\lambda < 0)$$

El comportamiento térmico es el mismo que un ferromagneto, con temperatura de transición

$$T_N = \frac{g^2 \mu_B}{3 k_B} (J+1) |A| M_s$$

conocida como temperatura de Néel.

Los sistemas donde las subredes no son equivalentes (en términos de su  $M_s$ ) se conocen como sistemas ferrimagnéticos. En ese caso,

$$M = M_+ + M_- \neq 0$$