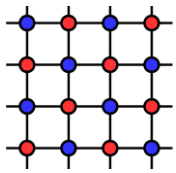
Magnetismo: Antiferromagnetismo; Dominios

<u>Antiferromagneto</u>: Interacción a primeros vecinos

$$\mathcal{H} = -\frac{J_{int}}{2}\sum_{<i,j>}\bar{S}_i\cdot\bar{S}_j + g_L\mu_B\bar{H}\cdot\sum_i\bar{S}_i\,, \qquad J_{int}<0$$



<u>Campo medio</u>

Para el sitio i,A: $\mathcal{H}_{i,A} = \bar{S}_{i,A}\cdot\left[-J_{int}z\langle\bar{S}_{j,B}\rangle + g_L\mu_B\bar{H}\right] = \bar{S}_{i,A}\cdot g_L\mu_B\bar{H}_{ef,B};\ \bar{H}_{ef,B} = \bar{H} - \frac{J_{int}}{g_L\mu_B}z\langle\bar{S}_{j,B}\rangle$ $= -\frac{\bar{m}_B}{g_L\mu_B}$

N° de coordinación

Para el sitio i,B: $\mathcal{H}_{i,B} = \bar{S}_{i,B}\cdot\left[-J_{int}z\langle\bar{S}_{j,A}\rangle + g_L\mu_B\bar{H}\right] = \bar{S}_{i,B}\cdot g_L\mu_B\bar{H}_{ef,A};\ \bar{H}_{ef,A} = \bar{H} - \frac{J_{int}}{g_L\mu_B}z\langle\bar{S}_{j,A}\rangle$ $= -\frac{\bar{m}_A}{g_L\mu_B}$

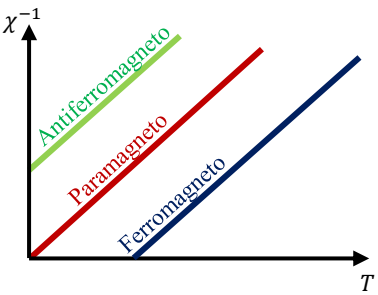
$$\bar{H} = H\hat{z} \rightarrow m_{A,B} = \frac{g_L\mu_B}{2}\left[(2S+1)\coth\left(\frac{\beta g_L\mu_B H_{ef,B,A}(2S+1)}{2}\right) - \coth\left(\frac{\beta g_L\mu_B H_{ef,B,A}}{2}\right)\right]$$

$$g_L\mu_B H_{ef} \ll k_BT \rightarrow m_{A,B} = \frac{(g_L\mu_B)^2}{3k_BT}S(S+1)H_{ef,B,A} = \frac{(g_L\mu_B)^2}{3k_BT}S(S+1)\left(H + \frac{zJ_{int}}{(g_L\mu_B)^2}m_{B,A}\right)$$

$$\rightarrow m_A = m_B = m \rightarrow m\left(1 - \frac{zJ_{int}}{3k_BT}S(S+1)\right) = \frac{(g_L\mu_B)^2}{3k_BT}S(S+1)H$$

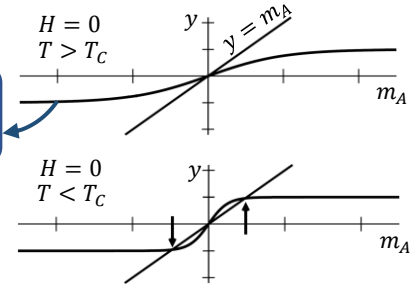
$$\rightarrow m = \frac{(g_L\mu_B)^2}{3k_BT - zJ_{int}S(S+1)}S(S+1)H$$

$$\rightarrow \chi = \frac{N}{V}\frac{(g_L\mu_B)^2}{3k_B(T+T_C)}S(S+1),\ \text{con}\ \ T_C = -\frac{zJ_{int}S(S+1)}{3k_B}$$



Por otro lado, analizando a campo nulo:

$$m_{A,B} = \frac{g_L\mu_B}{2}\left[(2S+1)\coth\left(\frac{\beta(2S+1)zJ_{int}}{2g_L\mu_B}m_{B,A}\right) - \coth\left(\frac{\beta zJ_{int}}{2g_L\mu_B}m_{B,A}\right)\right]$$



- $m_A = -m_B$ (coth es una función impar y $J_{int} < 0$)
- Magnetización espontánea (para cada subred) cuando $T < T_C$

<u>Anisotropía magnetocristalina</u>

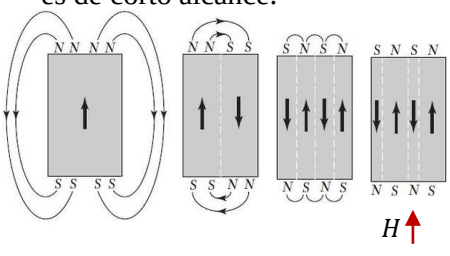
Debido al entorno anisotrópico de los átomos en una red cristalina, existen direcciones preferenciales para la orientación de los espines incluso en ausencia de campo magnético.

Una posibilidad sería: $\mathcal{H} = -\frac{J_{int}}{2}\sum_{<i,j>}\bar{S}_i\cdot\bar{S}_j - \kappa\sum_i(S_i^z)^2$ (Puede pensarse en un cristal tetragonal elongado en la dirección $\hat{z}$)

<u>Dominios magnéticos</u> (ferromagneto)

Si bien la interacción dipolar magnética es despreciable frente a la interacción de intercambio, se torna apreciable cuando se tienen suficientes átomos, como ocurre en un material macroscópico (~10^{23} átomos).

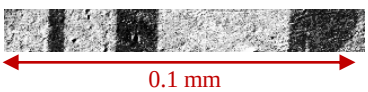
Esto sucede porque la interacción dipolar magnética es de largo alcance, mientras que la de intercambio es de corto alcance.



Energía magnetostática: $\frac{1}{8\pi}\int \mathrm{H}^2 dV$ Formar dominios magnéticos disminuye la energía total del sistema.

La región entre dominios recibe el nombre de "pared de dominio".

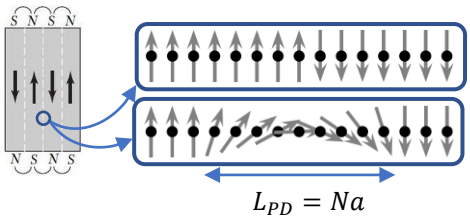
Aplicar un campo magnético externo desplaza paredes de dominio.



https://en.wikipedia.org/wiki/Magnetic_domain

Magnetismo: Dominios e histéresis

Pared de dominio



$$E_{int} = -J_{int}\bar{S}_i \cdot \bar{S}_j = -J_{int}S^2\cos(\theta_i - \theta_j) \approx -J_{int}S^2\left(1 - \frac{(\delta\theta)^2}{2}\right)$$

$$\rightarrow \delta E_{int} = J_{int}S^2\,(\delta\theta)^2/2 = J_{int}S^2\,(\pi/N)^2/2$$

$$\rightarrow E_{int}^{PD} = NJ_{int}S^2\,(\pi/N)^2/2 = J_{int}S^2\,\pi^2/2N$$

$$E_{ani} = -\kappa(S_i^z)^2 = -\kappa[S\cos\theta_i]^2 \rightarrow \delta E_{ani} = \kappa S^2(1-\cos^2\theta_i) \rightarrow E_{ani}^{PD} = \sum_i \kappa S^2 \mathrm{sen}^2\theta_i$$

$$\rightarrow E_{ani}^{PD} = \kappa S^2\int_0^{\pi}\mathrm{sen}^2\theta d\theta\left(\frac{N}{\pi}\right) = \frac{N}{\pi}\kappa S^2\int_0^{\pi}\frac{1-\cos(2\theta)}{2}d\theta = \frac{N}{\pi}\kappa S^2\left(\frac{\theta}{2} - \frac{\mathrm{sen}(2\theta)}{4}\right)\Big|_0^{\pi} = \frac{N\kappa S^2}{2}$$

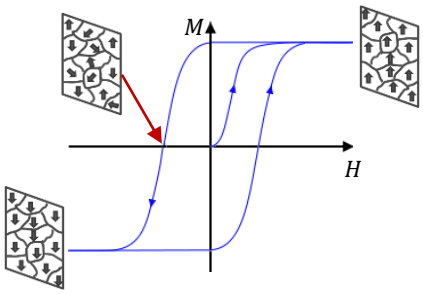
($= \pi/2$)

$$\rightarrow E_{Total}^{PD} = \frac{J_{int}S^2\,\pi^2}{2N} + \frac{N\kappa S^2}{2} \rightarrow \frac{\partial E_{Total}^{PD}}{\partial N} = 0 = -\frac{J_{int}S^2\,\pi^2}{2N^2} + \frac{\kappa S^2}{2} \rightarrow \frac{J_{int}\,\pi^2}{N^2} = \kappa$$

$$\rightarrow N = \pi\sqrt{J_{int}/\kappa} \rightarrow E_{Total,min}^{PD} = \pi S^2\sqrt{J_{int}\kappa}$$

(Notar que si un cristal es extremadamente pequeño, puede resultar conveniente formar un monodominio)

Histéresis en ferromagnetos



Para un grano cristalino: $\frac{\Delta E}{V} = g_L\mu_B\rho\bar{S}\cdot\bar{H} - \kappa\rho S_{eje-grano}^2 + int$

(Densidad de espines; Componente a lo largo de eje-grano; cte)

$$\rightarrow \frac{\Delta E}{V} = -\bar{M}\cdot\bar{H} - \kappa\frac{M_{eje-grano}^2}{(g_L\mu_B)^2\rho} = -\bar{M}\cdot\bar{H} - \kappa' M_{eje-grano}^2$$

$$\bar{H} = H\hat{z} \rightarrow \frac{\Delta E}{V} = -|M||H|\cos\theta - \kappa'|M|^2\cos^2(\theta - \phi)$$

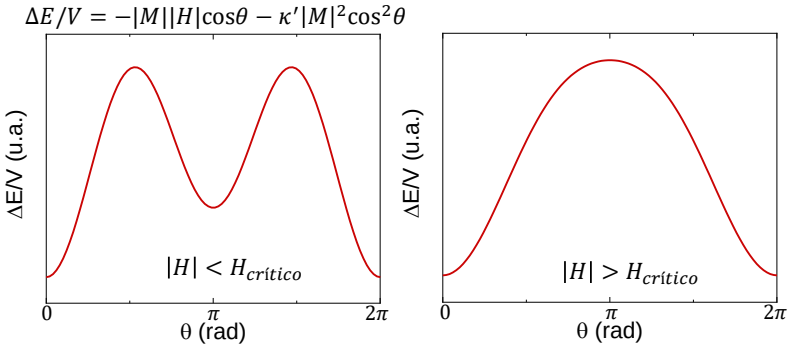
($= 0$; $\hat{z}$; ϕ; Eje grano)

$\rightarrow \Delta E$ es mínimo cuando $\bar{M}$ y $\bar{H}$ son paralelos, y puede existir un mínimo relativo cuando son antiparalelos.

$$\frac{\partial(\Delta E)}{\partial\theta} = 0 \rightarrow -|M||H|\mathrm{sen}\theta - 2\kappa'|M|^2\cos\theta\,\mathrm{sen}\theta = 0 \rightarrow \theta = 0, \pi, \arccos\left(-\frac{|H|}{2\kappa'|M|}\right)$$

$$\rightarrow H_{crítico} = 2\kappa'|M| \rightarrow \text{Si } |H| < H_{crítico} \text{ existe un mínimo relativo, además del mínimo absoluto}$$

Si $\bar{M}$ apunta en la dirección $-\hat{z}$ y se aplica un campo en la dirección $\hat{z}$ → Debe ser suficientemente grande ($> H_{crítico}$) para rotar a los espines.



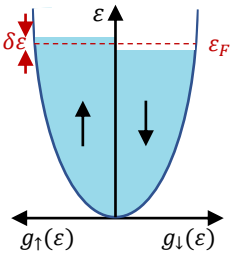
Magnetismo: Ferromagnetismo itinerante

Magnetismo itinerante: Orden magnético a campo nulo

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{Tight-Binding} + \mathcal{H}_{Hubbard} \qquad \mathcal{H}_{Hubbard} = U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$

i: Corre sobre sitios de la red
U: Costo energético por tener 2e⁻ en el mismo sitio
$n_{i\uparrow}(n_{i\downarrow})$: N° de e⁻ con espín ↑ (↓) en el sitio i

¿Conviene tener $\rho_\uparrow \neq \rho_\downarrow$?



$$\rightarrow \begin{cases} \varepsilon_{F,\uparrow} = \varepsilon_F + \delta\varepsilon/2 \\ \varepsilon_{F,\downarrow} = \varepsilon_F - \delta\varepsilon/2 \end{cases} \rightarrow \rho_\uparrow - \rho_\downarrow = \int_0^{\varepsilon_F+\frac{\delta\varepsilon}{2}} \frac{g(\varepsilon)}{2}d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F-\frac{\delta\varepsilon}{2}} \frac{g(\varepsilon)}{2}d\varepsilon \approx \delta\varepsilon\frac{g(\varepsilon_F)}{2}$$

N° medio de e⁻ por sitio: x $\qquad = (\rho_\uparrow - \rho_\downarrow)v$

Aproximo: $Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} = \frac{U}{4}(n_{i\uparrow}+n_{i\downarrow})^2 - \frac{U}{4}(n_{i\uparrow}-n_{i\downarrow})^2 \approx \frac{U}{4}\overbrace{\langle n_{i\uparrow}+n_{i\downarrow}\rangle}^{x}{}^2 - \frac{U}{4}\overbrace{\langle n_{i\uparrow}-n_{i\downarrow}\rangle}^{(\rho_\uparrow-\rho_\downarrow)v}{}^2$

Magnetización: $M = -\frac{g}{2}\mu_B(\rho_\uparrow - \rho_\downarrow) = -\frac{g\mu_B\delta\varepsilon}{4}g(\varepsilon_F) \rightarrow \frac{E_{Hubbard}}{V} = \boxed{\frac{U}{4}\frac{x^2}{v} - \frac{U}{v}\left(\frac{Mv}{g\mu_B}\right)^2}$

E cinética: $\frac{K}{V} = \int_0^{\varepsilon_F+\frac{\delta\varepsilon}{2}} \varepsilon\frac{g(\varepsilon)}{2}d\varepsilon + \int_0^{\varepsilon_F-\frac{\delta\varepsilon}{2}} \varepsilon\frac{g(\varepsilon)}{2}d\varepsilon = 2\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon\frac{g(\varepsilon)}{2}d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F+\frac{\delta\varepsilon}{2}} \varepsilon\frac{g(\varepsilon)}{2}d\varepsilon - \int_{\varepsilon_F-\frac{\delta\varepsilon}{2}}^{\varepsilon_F} \varepsilon\frac{g(\varepsilon)}{2}d\varepsilon$

$= K(M=0)$

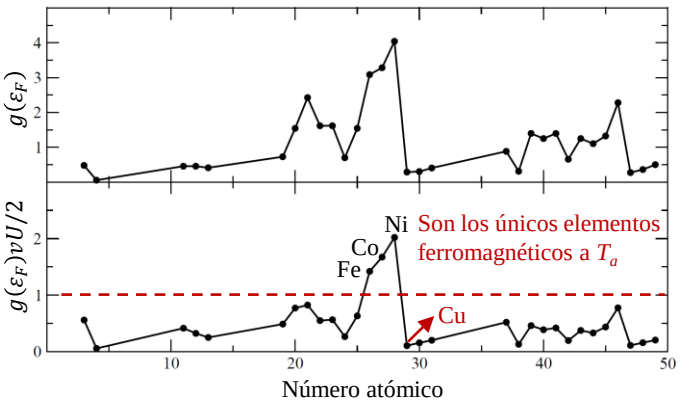
$$\approx \frac{K_0}{V} + \frac{g(\varepsilon_F)}{2}\left\{\left[\frac{(\varepsilon_F+\delta\varepsilon/2)^2}{2} - \frac{\varepsilon_F^2}{2}\right] - \left[\frac{\varepsilon_F^2}{2} - \frac{(\varepsilon_F-\delta\varepsilon/2)^2}{2}\right]\right\} = \frac{K_0}{V} + \frac{g(\varepsilon_F)}{2}\left(\frac{\delta\varepsilon}{2}\right)^2 = \boxed{\frac{K_0}{V} + \frac{g(\varepsilon_F)}{2}\left(\frac{2M}{g\mu_B g(\varepsilon_F)}\right)^2}$$

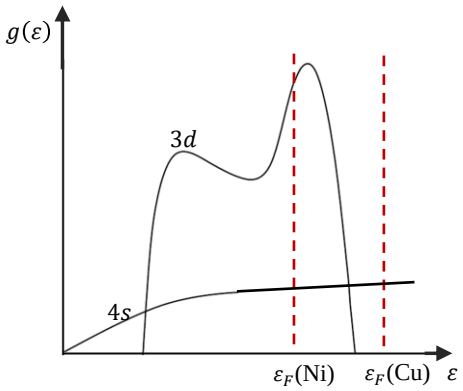
Magnetismo itinerante: Orden magnético a campo nulo

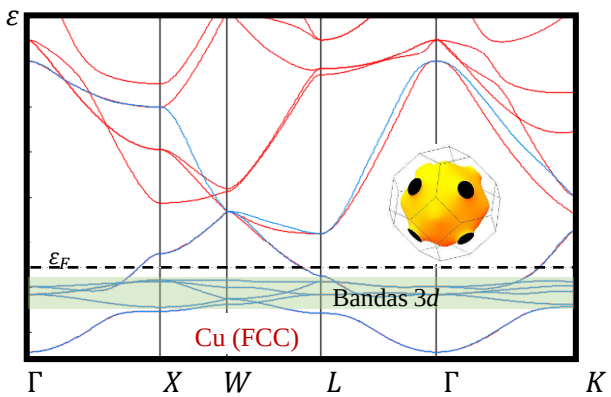
$$\frac{E}{V} = \frac{K + E_{Hubbard}}{V} = \frac{K_0 + U_0}{V} + \frac{1}{2g(\varepsilon_F)}\left(\frac{2M}{g\mu_B}\right)^2 - \frac{U}{v}\left(\frac{Mv}{g\mu_B}\right)^2 = \frac{E_0}{V} + \left(\frac{M}{g\mu_B}\right)^2\left[\frac{2}{g(\varepsilon_F)} - vU\right]$$

$= E_{Hubbard}(M=0)$ $\qquad = E(M=0)$

¿Cuándo conviene tener $M \neq 0$? $\rightarrow \frac{2}{g(\varepsilon_F)} - vU < 0 \rightarrow g(\varepsilon_F) > \frac{2}{vU} \rightarrow \frac{g(\varepsilon_F)vU}{2} > 1$ (Criterio de Stoner)







Magnetismo: Tabla periódica

Magnetismo en la tabla periódica

Considerando todas las contribuciones, se obtiene un comportamiento dominante.

(e^- de conducción: paramagnetismo de Pauli: $\chi_{Pauli} = \mu_B^2 g(\varepsilon_F)$; diamagnetismo de Landau: $\chi_{Landau} \overset{e^- \text{ libres}}{=} -\frac{1}{3}\chi_{Pauli}$)