

# Magnetismo III

Prof. Alberto Camjayi

# Introducción

## El modelo de Heisenberg

En la clase anterior vimos que la interacción de Coulomb más el principio de exclusión llevan a una interacción efectiva entre espines que toma la forma del hamiltoniano de Heisenberg:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j.$$

Las constantes de acoplamiento son simétricas,  $J_{ij} = J_{ji}$  y la suma se extiende a toda la red.

Por supuesto no toma en cuenta todas las contribuciones posibles, como anisotropías o términos de orden superior en la interacción de intercambio, pero es lo suficientemente general como para describir multitud de compuestos.

# Caso ferromagnético

## Estado fundamental ferromagnético

El problema técnico principal del hamiltoniano de Heisenberg es que los operadores de espín no conmutan.

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= - \sum_{i < j} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) = \\ &= - \sum_{i < j} J_{ij} \left( \frac{S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+}{2} + S_i^z S_j^z \right)\end{aligned}$$

El último término obviamente es diagonal en la base usual  $|S m_z\rangle$ , pero los dos primeros cambian el número cuántico de la proyección de espín.

# Caso ferromagnético

## Estado fundamental ferromagnético

Definiendo el espín total como  $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i$ , obtenemos

$$[S^z, \mathcal{H}] = -\frac{1}{2} \sum_{ijk} J_{ij} [S_k^z, S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z] =$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{ijk} J_{ij} (S_i^x [S_k^z, S_j^x] + [S_k^z, S_i^x] S_j^x + S_i^y [S_k^z, S_j^y] + [S_k^z, S_i^y] S_j^y)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{ijk} J_{ij} (S_i^x \delta_{kj} i S_j^y + \delta_{ki} i S_i^y S_j^x - S_i^y \delta_{kj} i S_j^x - \delta_{ki} i S_i^x S_j^y)$$

$$\implies [S^z, \mathcal{H}] = 0 \text{ y de igual manera } [S^x, \mathcal{H}] = [S^y, \mathcal{H}] = 0$$

# Caso ferromagnético

## Estado fundamental ferromagnético

Por lo tanto podemos encontrar autoestados simultáneos de  $\mathcal{H}$ ,  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}$  y  $S^z$  (C.C.O.C).

Consideremos el estado con máximo espín total y todos los espines alineados en la dirección z:

$$|\psi\rangle = |S, S\rangle_1 |S, S\rangle_2 \dots |S, S\rangle_N$$

Si aplicamos el hamiltoniano tendremos

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = - \sum_{i < j} J_{ij} \left( \frac{1}{2} S_i^+ S_j^- |\psi\rangle + \frac{1}{2} S_i^- S_j^+ |\psi\rangle + S_i^z S_j^z |\psi\rangle \right)$$

$$= - \sum_{i < j} J_{ij} S S |\psi\rangle = -S^2 \sum_{i < j} J_{ij} |\psi\rangle$$

# Caso ferromagnético

## Estado fundamental ferromagnético

Así concluimos que el estado  $|\psi\rangle$  es autoestado del hamiltoniano. Dado que este último es invariante ante rotaciones en el espacio de espín, lo mismo vale para cualquier estado con espín total máximo, *i.e.* es  $2S_{\text{tot.}} + 1$  veces degenerado.

Hasta ahora no hemos dicho nada de los  $J_{ij}$ .

Consideremos por tanto un estado producto arbitrario

$$|\phi\rangle = |Sm_1\rangle |Sm_2\rangle \dots |Sm_N\rangle$$

y calculemos el valor de expectación del hamiltoniano. En general este estado no es un autoestado.

# Caso ferromagnético

## Estado fundamental ferromagnético

Explícitamente

$$\begin{aligned} \langle \phi | \mathcal{H} | \phi \rangle &= \\ &= - \sum_{i < j} J_{ij} \left( \frac{1}{2} \langle \phi | S_i^+ S_j^- | \phi \rangle + \frac{1}{2} \langle \phi | S_i^- S_j^+ | \phi \rangle + \langle \phi | S_i^z S_j^z | \phi \rangle \right) \\ &= - \sum_{i < j} J_{ij} m_i m_j \end{aligned}$$

Si  $J_{ij} \geq 0 \forall i, j \implies J_{ij} m_i m_j \leq J_{ij} S^2$ , y por lo tanto

# Caso ferromagnético

## Estado fundamental ferromagnético

$$\langle \phi | \mathcal{H} | \phi \rangle \geq -S^2 \sum_{i < j} J_{ij} \quad (1)$$

Como los estados producto  $|\phi\rangle$  forman una base, podemos concluir que todas las autoenergías, y en particular la del estado fundamental, son mayores o iguales a (1).

Como  $|\psi\rangle$  es un autoestado de autovalor  $-S^2 \sum_{i < j} J_{ij}$ , concluimos que:

***El estado completamente polarizado es un estado fundamental del hamiltoniano de Heisenberg, con todos los  $J_{ij} \geq 0$ .***



# Caso ferromagnético

## Estado fundamental ferromagnético

En resumen, si todas las interacciones de intercambio son **mayores o iguales a cero**, los estados completamente polarizados (con máximo  $S_{\text{tot.}}$ ) son estados fundamentales. Además, puede demostrarse que si todos los pares  $i, j$  están conectados por interacciones, estos son los **únicos** estados fundamentales.

Hemos encontrado por lo tanto el estado fundamental del hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético.

Nótese que la solución polarizada “eligió” una dirección particular y por tanto tiene menos simetría que el hamiltoniano. Decimos en estos casos que el estado fundamental presenta una “ruptura de simetría”.

# Caso antiferromagnético

## Estado fundamental antiferromagnético

Si algunos términos de interacción son negativos, el estado totalmente polarizado es todavía autoestado, pero no más el fundamental.

Prácticamente nada se conoce rigurosamente del estado fundamental del hamiltoniano de Heisenberg general.

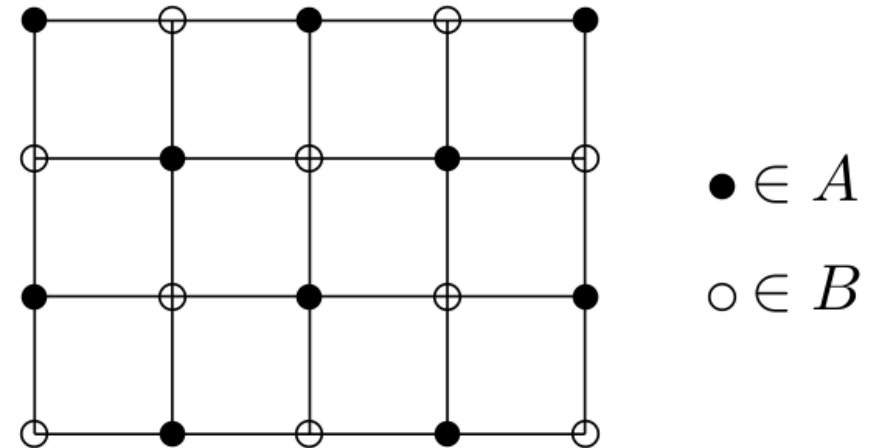
Una clase especial, donde se saben resultados exactos, es el de los antiferromagnetos en ***redes bipartidas***.

# Caso antiferromagnético

## Estado fundamental antiferromagnético

Una red es bipartida si todos sus sitios se pueden dividir en dos subredes separadas  $A$  y  $B$ , de tal manera que todos los primeros vecinos de una subred, pertenecen a la otra.

En el contexto del hamiltoniano magnético de Heisenberg, el sistema será bipartido si se cumple:



$$J_{ij} = \begin{cases} = 0 & \text{si } i, j \in \text{misma subred.} \\ \neq 0 & \text{si } i, j \notin \text{misma subred.} \end{cases}$$

# Caso antiferromagnético

## Estado fundamental antiferromagnético

Si todos los  $J_{ij} \leq 0$  en una red bipartida, un claro candidato para el estado fundamental es aquel con polarización total en cada una de las subredes y con direcciones opuestas: ***el estado de Néel***.

Sin embargo, si aplicamos el hamiltoniano al estado de Néel

$$|\psi\rangle = \prod_{i \in A} |S, S\rangle_i \prod_{j \in B} |S, -S\rangle_j$$

podremos verificar que ***ni siquiera es autoestado***.

# Caso antiferromagnético

## Estado fundamental antiferromagnético

Pese a que el estado de Néel no es autoestado, ni mucho menos el estado fundamental, existe un resultado importante respecto de antiferromagnetismo en redes bipartidas.

### Teorema de Marshall-Lieb-Mattis

En el modelo de Heisenberg en una red bipartida, con dos subredes del mismo tamaño y  $J_{ij} \leq 0, \forall i, j \in \text{subredes diferentes}$ , si todos los sitios están alcanzados por algún  $J_{ij} \neq 0$ , entonces su **estado fundamental es no-degenerado y un singlete del espín total**:

$$\mathbf{S}|\psi\rangle = 0$$

(A. Auerbach, Interacting electrons and quantum magnetism).

# Métodos de solución

## Como “resolver” el modelo

La solución general del modelo de Heisenberg es un problema muy complejo y, por lo tanto, varias estrategias y simplificaciones son utilizadas para encontrar soluciones.

Una muy conocida es limitarnos a considerar la proyección de espín en el eje  $z$ : el **modelo de Ising**.

El modelo de Ising ha sido y es fundamental en Mecánica estadística y en la física de las transiciones de fase.

# Métodos de solución

## Como “resolver” el modelo

La solución general del modelo de Heisenberg es un problema muy complejo y, por lo tanto, varias estrategias y simplificaciones son utilizadas para encontrar soluciones. Otra alternativa, es olvidar las relaciones de conmutación y resolver el hamiltoniano clásico, donde ahora los espines son simples vectores. Incluso en este caso, salvo en las versiones más simples, las soluciones son difíciles de obtener y se deben usar métodos numéricos. Así se han encontrado multitud de ordenes magnéticos, que generalizan los más conocidos ferromagnéticos y antiferromagnéticos. Esta aproximación es buena cuando el espín es grande y la dimensionalidad alta.

# Métodos de solución

## Como “resolver” el modelo

La solución general del modelo de Heisenberg es un problema muy complejo y, por lo tanto, varias estrategias y simplificaciones son utilizadas para encontrar soluciones. Si además del estado fundamental buscamos la solución de equilibrio termodinámico, el problema es aún más complicado. La aproximación más usual es la **formulación de campo medio**.

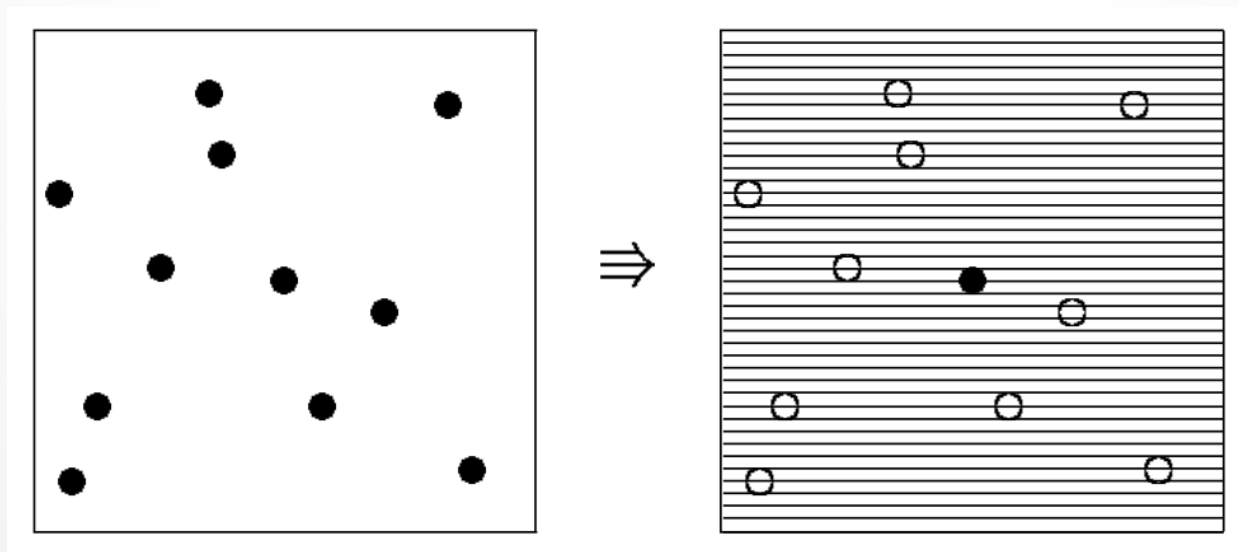


# Teoría de campo medio

## Las interacciones en “promedio” [Bruus]

En algunas situaciones se puede obtener un buen modelo físico concentrándonos en una partícula genérica y tratando los efectos de las demás “en promedio”.

Esto significa que el problema se reduce al de una partícula embebida en un medio externo que, formalmente, siempre es posible resolver.



# Teoría de campo medio

## Idea general

Consideremos un sistema compuesto por dos tipos de partículas,  $a$  y  $b$ , y donde las interacciones más importantes se dan entre partículas distintas:

$$\mathcal{H} = H_0 + V$$

$$H_0 = \sum_{\nu} \xi_{\nu}^a \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} + \sum_{\mu} \xi_{\mu}^b \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}$$

$$V = \sum_{\nu\nu', \mu\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \hat{a}_{\nu'}$$

# Teoría de campo medio

## Idea general

Supongamos ahora que los operadores densidad se desvían muy poco de los valores promedio:  $\hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \approx \langle \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \rangle$  y  $\hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_{\mu'} \approx \langle \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_{\mu'} \rangle$ . Por lo tanto, es natural, considerar la desviación como un parámetro pequeño para hacer un desarrollo perturbativo:

$$d_{\nu\nu'} = \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} - \langle \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \rangle$$

$$d_{\mu\mu'} = \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_{\mu'} - \langle \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_{\mu'} \rangle$$

# Teoría de campo medio

## Idea general

Si reescribimos el hamiltoniano (exacto), obtendremos

$$H = H_0 + V_{MF} + \sum_{\nu\nu', \mu\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} d_{\nu\nu'} d_{\mu\mu'}$$

donde

$$V_{MF} = \sum_{\nu\nu', \mu\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left( \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle + \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \right) - \\ - \sum_{\nu\nu', \mu\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle$$

# Teoría de campo medio

## Idea general

En campo medio, el último término se desprecia

$$H = H_0 + V_{MF} + \sum_{\nu\nu', \mu\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} d_{\nu\nu'} d_{\mu\mu'} \approx 0$$

y entonces

$$H_{MF} = H_0 + V_{MF}$$

Observemos que **el hamiltoniano de campo medio es de un cuerpo** y que siempre puede ser diagonalizado.

# Teoría de campo medio

## Auto consistencia

Resta determinar los valores medios que adquieren las densidades. Hay dos maneras de hacerlo, ambas equivalentes. Podemos calcular las densidades sobre el nuevo hamiltoniano, para las partículas  $a$  (para las  $b$  es análogo):

$$n_{\nu\nu'}^a = \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle_{MF} \equiv \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H_{MF}} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'})}{\text{Tr}(e^{-\beta H_{MF}})}$$

O podemos extremar la energía libre:

$$0 = \frac{dF_{MF}}{dn_{\nu\nu'}^b} = \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} \left( e^{-\beta H_{MF}} \frac{dH_{MF}}{dn_{\nu\nu'}^b} \right)$$

# Teoría de campo medio

## Auto consistencia

Resta determinar los valores medios que adquieren las densidades. Hay dos maneras de hacerlo, ambas equivalentes. Podemos calcular las densidades sobre el nuevo hamiltoniano, para las partículas  $a$  (para las  $b$  es análogo):

$$n_{\nu\nu'}^a = \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle_{MF} \equiv \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H_{MF}} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'})}{\text{Tr}(e^{-\beta H_{MF}})}$$

O podemos extremar la energía libre:

$$0 = \frac{dF_{MF}}{dn_{\nu\nu'}^b} = \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \left( \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle_{MF} - n_{\nu\nu'}^a \right)$$

equivalentes

# Teoría de campo medio

## El “arte” del campo medio

¿Cómo elegimos los parámetros del campo medio? ¿Cuáles son las densidades que debemos aproximar por su valor medio? Las posibilidades son demasiadas para ser tratadas y por lo tanto, la intuición física debe guiar las elecciones.

Por supuesto las simetrías del problema ayudan a limitar el número de las posibles elecciones.

Por ejemplo, si un sistema es invariante translacional, es natural suponer que el sistema es homogéneo:

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'} \rangle = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \rangle$$

$$\langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \rangle = f(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Rightarrow \langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'} \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$



# Teoría de campo medio

## Aproximación de Hartree-Fock

Pasemos ahora al caso usual donde hay un solo tipo de partículas. ¿Cuáles son las posibles densidades a considerar solo como valores medios, despreciando sus fluctuaciones?

$$H = H_0 + V$$

$$H_0 = \sum_{\nu} \xi_{\nu} \hat{c}_{\nu}^{\dagger} \hat{c}_{\nu}$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu', \mu\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \hat{c}_{\nu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu'} \hat{c}_{\nu'}$$

# Teoría de campo medio

## Aproximación de Hartree-Fock

Pasemos ahora al caso usual donde hay un solo tipo de partículas. ¿Cuáles son las posibles densidades a considerar solo como valores medios, despreciando sus fluctuaciones?

$$H = H_0 + V$$

$$H_0 = \sum_{\nu} \xi_{\nu} \hat{c}_{\nu}^{\dagger} \hat{c}_{\nu}$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu', \mu\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \hat{c}_{\nu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu'} \hat{c}_{\nu'}$$

# Teoría de campo medio

## Aproximación de Hartree-Fock

Pasemos ahora al caso usual donde hay un solo tipo de partículas. Tomemos:

$$\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} = \langle \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \rangle + (\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} - \langle \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \rangle) \equiv \langle \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \rangle + \hat{d}_{\nu\nu'}$$

Fluctuaciones  $\ll 1$



$$\hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} = \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle + (\hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} - \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle) \equiv \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle + \hat{d}_{\mu\mu'}$$

# Teoría de campo medio

## Aproximación de Hartree-Fock

Pasemos ahora al caso usual donde hay un solo tipo de partículas. Reemplazando en el término de interacción

$$\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \hat{c}_{\nu'} = \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle + \hat{c}_\nu^\dagger \hat{d}_{\mu\mu'} \hat{c}_{\nu'} =$$

$$= \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle + \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \hat{d}_{\mu\mu'}$$

$$= \langle \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \rangle \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle + \hat{d}_{\nu\nu'} \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle + \langle \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \rangle \hat{d}_{\mu\mu'} + \hat{d}_{\nu\nu'} \hat{d}_{\mu\mu'} \xrightarrow{\sim 0}$$

$$\approx \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle + \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \langle \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \rangle - \langle \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_{\nu'} \rangle \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle$$

# Teoría de campo medio

## Aproximación de Hartree-Fock

Pasemos ahora al caso usual donde hay un solo tipo de partículas. Así, el potencial resulta

$$V^{\text{Hartree}} \approx \frac{1}{2} \sum_{\nu\mu, \nu'\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} (n_{\mu\mu'} \hat{c}_{\nu}^{\dagger} \hat{c}_{\nu'} + n_{\nu\nu'} \hat{c}_{\mu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu'} - n_{\nu\nu'} n_{\mu\mu'})$$

Este es el potencial de Hartree. Sin embargo, esto no es todo, porque hay otro término de densidad posible

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu', \mu\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} \hat{c}_{\nu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu'} \hat{c}_{\nu'}$$

# Teoría de campo medio

## Aproximación de Hartree-Fock

Pasemos ahora al caso usual donde hay un solo tipo de partículas. El cálculo es completamente análogo y se puede obtener de Hartree intercambiando los índices

$$V^{\text{Fock}} \approx -\frac{1}{2} \sum_{\nu\mu, \nu'\mu'} V_{\nu\mu, \nu'\mu'} (n_{\nu\mu'} \hat{c}_{\mu}^{\dagger} \hat{c}_{\nu'} + n_{\mu\nu'} \hat{c}_{\nu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu'} - n_{\nu\mu'} n_{\mu\nu'})$$

Este es el potencial de Fock que surge debido a la indistinguibilidad de las partículas. Se lo conoce también como el término de intercambio. En la aproximación de HF, resulta entonces

$$H^{HF} = H_0 + V^{\text{Hartree}} + V^{\text{Fock}}.$$

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los hamiltonianos de espines?

De alguna manera, el campo medio es más “natural”. Los operadores de espín ya son operadores de un cuerpo y la “densidad” es naturalmente la magnetización.

Resolvamos un ejemplo sencillo,

$$H = -2 \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

donde

$$J_{ij} = \begin{cases} J_0 > 0 & \text{si } i, j \text{ son N.N.} \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los hamiltonianos de espines?

De alguna manera, el campo medio es más “natural”. Los operadores de espín ya son operadores de un cuerpo y la “densidad” es naturalmente la magnetización.

En campo medio

$$H \approx H_{MF} =$$

$$= -2 \sum_{ij} J_{ij} \langle \mathbf{S}_i \rangle \cdot \mathbf{S}_j - 2 \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \langle \mathbf{S}_j \rangle + 2 \sum_{ij} J_{ij} \langle \mathbf{S}_i \rangle \cdot \langle \mathbf{S}_j \rangle$$



# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los hamiltonianos de espines?

De alguna manera, el campo medio es más “natural”. Los operadores de espín ya son operadores de un cuerpo y la “densidad” es naturalmente la magnetización.

Por simetría de translación, vamos a suponer que el valor medio del espín es independiente del sitio y, como buscamos una fase ordenada, distinto de cero.

Eligiendo el eje  $z$  en la dirección de magnetización, nuestra suposición es

$$\langle \mathbf{S}_i \rangle = \langle S_z \rangle \hat{z}$$

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los hamiltonianos de espines?

De alguna manera, el campo medio es más “natural”. Los operadores de espín ya son operadores de un cuerpo y la “densidad” es naturalmente la magnetización.

El campo magnético local, que afecta a cada espín es

$$\mathbf{m} = 2 \sum_j J_{ij} \langle S_z \rangle \hat{z} = 2z J_0 \langle S_z \rangle \hat{z}$$

donde  $z$  es el número de primeros vecinos.

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los hamiltonianos de espines?

De alguna manera, el campo medio es más “natural”. Los operadores de espín ya son operadores de un cuerpo y la “densidad” es naturalmente la magnetización.

Reemplazando

$$H_{MF} = -2 \sum_i \mathbf{m} \cdot \mathbf{S}_i + mN \langle S_z \rangle$$

donde  $N$  es el número de sitios y  $m = |\mathbf{m}|$ .

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los hamiltonianos de espines?

De alguna manera, el campo medio es más “natural”. Los operadores de espín ya son operadores de un cuerpo y la “densidad” es naturalmente la magnetización.

Para seguir avanzando, hagamos  $S = 1/2$ . La función de partición es en este caso

$$\begin{aligned} Z_{MF} &= \left( e^{\beta m} + e^{-\beta m} \right)^N e^{\beta N m \langle S_z \rangle} = \\ &= \left[ \left( e^{\beta m} + e^{-\beta m} \right) e^{\beta m^2 / 2z J_0} \right]^N \end{aligned}$$

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los hamiltonianos de espines?

De alguna manera, el campo medio es más “natural”. Los operadores de espín ya son operadores de un cuerpo y la “densidad” es naturalmente la magnetización.

Para seguir avanzando, hagamos  $S = 1/2$ . La autoconsistencia

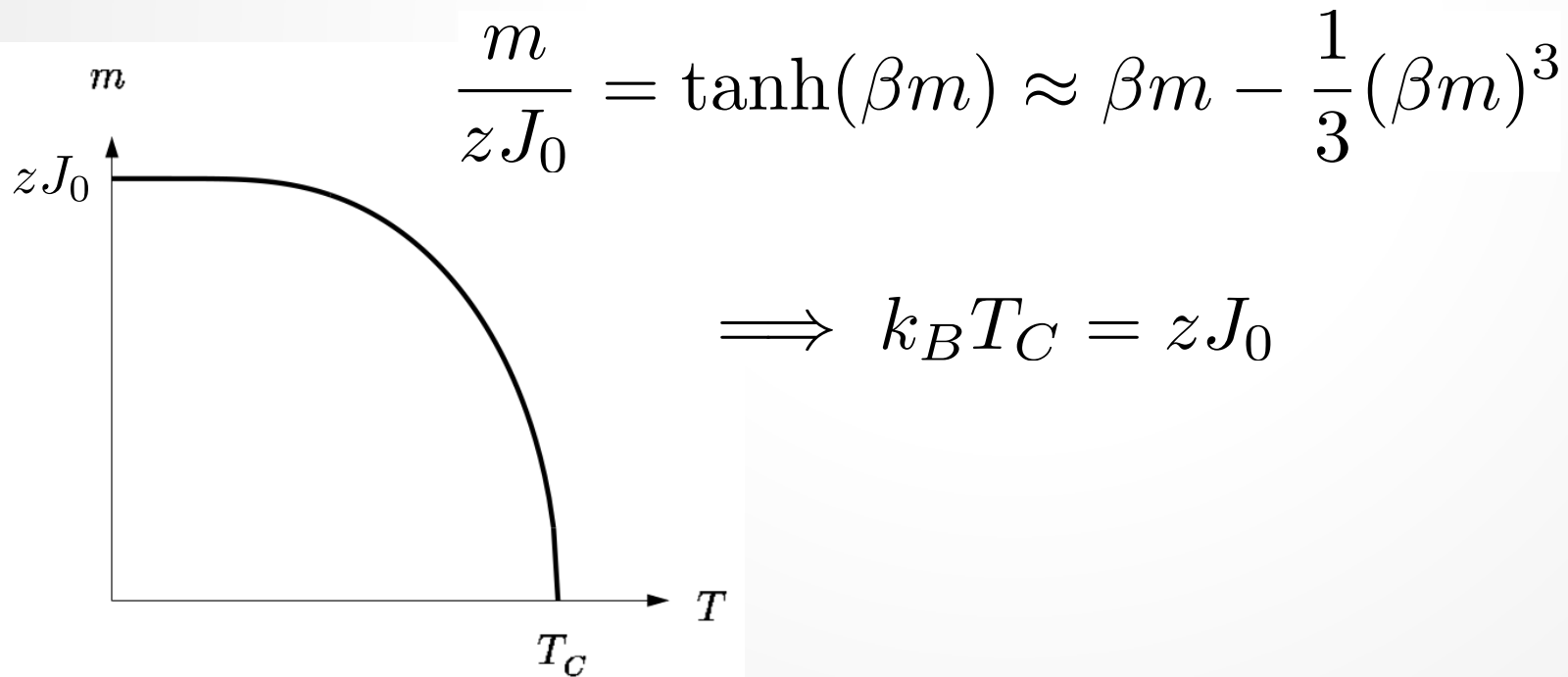
$$\begin{aligned}\frac{\partial F_{MF}}{\partial m} &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial m} \ln Z_{MF} = \\ &= -N \left( \frac{e^{\beta m} - e^{-\beta m}}{e^{\beta m} + e^{-\beta m}} \right) + N \frac{m}{zJ_0} = 0\end{aligned}$$

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los hamiltonianos de espines?

De alguna manera, el campo medio es más “natural”. Los operadores de espín ya son operadores de un cuerpo y la “densidad” es naturalmente la magnetización.

Para seguir avanzando, hagamos  $S = 1/2$ . La autoconsistencia



# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los ferromagnetos metálicos?

El hamiltoniano de Heisenberg, en todas sus versiones, da cuenta de estados magnéticos donde los grados de libertad de carga están “congelados”. Es importante para compuestos donde los electrones están localizados fuertemente en los iones y pueden ser considerados simplemente como “momentos locales”.

Sin embargo, esta aproximación es incorrecta en metales donde las correlaciones son importantes pero los electrones siguen siendo deslocalizados como en el hierro o níquel.

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los ferromagnetos metálicos?

Para considerar estos casos, recordemos que el modelo de Heisenberg es el límite de interacción mucho mayor a la energía cinética del modelo de Hubbard. Por lo tanto, volvamos al mismo y veamos que sucede con el ferromagnetismo cuando conservamos ambos términos, cinético y potencial.

En el espacio de momentos el hamiltoniano de Hubbard es

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{q} \\ \mathbf{k}'\sigma'}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}.$$



# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los ferromagnetos metálicos?

Usemos ahora la aproximación de Hartree-Fock para encontrar una solución ferromagnética, permitiendo que los valores medios dependan del espín:

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}\uparrow} \quad \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}\downarrow}$$

El término de interacción resulta

$$V^{MF} = \frac{U}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{q} \\ \mathbf{k}'\sigma'}} \left[ \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \langle \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} - \langle \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right]$$

$$- \frac{1}{2} \left( \langle \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \langle \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle - \langle \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle \langle \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \right)$$

# Teoría de campo medio

## ¿Qué pasa con los ferromagnetos metálicos?

Usemos ahora la aproximación de Hartree-Fock para encontrar una solución ferromagnética, permitiendo que los valores medios dependan del espín:

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}\uparrow} \quad \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}\downarrow}$$

Evaluando los valores medios:

$$V^{MF} = U \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} [n_{\sigma'} - n_{\sigma} \delta_{\sigma\sigma'}] - UV \sum_{\sigma\sigma'} n_{\sigma} n_{\sigma'} + UV \sum_{\sigma} n_{\sigma}^2$$

con

$$n_{\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle.$$

# Teoría de campo medio

## Modelo de Stoner

En Hartree-Fock, por lo tanto, el hamiltoniano de Hubbard es

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}\sigma}^{MF} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{UV}{2} \sum_{\sigma\sigma'} n_\sigma n_{\sigma'} + \frac{UV}{2} \sum_{\sigma} n_\sigma^2,$$

con

$$\xi_{\mathbf{k}\sigma}^{MF} = \xi_{\mathbf{k}\sigma} + U(n_\uparrow + n_\downarrow - n_\sigma) = \xi_{\mathbf{k}\sigma} + Un_{\bar{\sigma}}.$$

$$(\bar{\sigma} = -\sigma)$$

# Teoría de campo medio

## Modelo de Stoner

La condición de autoconsistencia es ( $f$  es la función de Fermi):

$$n_{\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}} \rangle_{MF} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} f(\xi_{\mathbf{k}\sigma}^{MF}).$$

A  $T = 0$ ,

$$n_{\uparrow} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \Theta \left( \mu - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - U n_{\downarrow} \right) = \frac{1}{6\pi^2} k_{F\uparrow}^3$$

donde  $\frac{\hbar^2 k_{F\uparrow}^2}{2m} + U n_{\downarrow} = \mu$  y otra análoga para el espín down.

# Teoría de campo medio

## Modelo de Stoner

Escribiendo el  $k_F$  en función de las densidades, llegamos al sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} (6\pi)^{2/3} n_{\uparrow}^{2/3} + U n_{\downarrow} = \mu \\ \frac{\hbar^2}{2m} (6\pi)^{2/3} n_{\downarrow}^{2/3} + U n_{\uparrow} = \mu \end{cases}$$

# Teoría de campo medio

## Modelo de Stoner

Definiendo la magnetización relativa  $M = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}}$  y la interacción  $\gamma = \frac{2mU(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}2}$  podemos restar las

ecuaciones autoconsistentes para obtener:

$$\gamma M = (1 + M)^{2/3} - (1 - M)^{2/3}$$

Esta expresión tiene tres tipos de soluciones.

# Teoría de campo medio

## Modelo de Stoner

Definiendo la magnetización relativa  $M = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}}$  y la interacción  $\gamma = \frac{2mU(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}2}$  podemos restar las

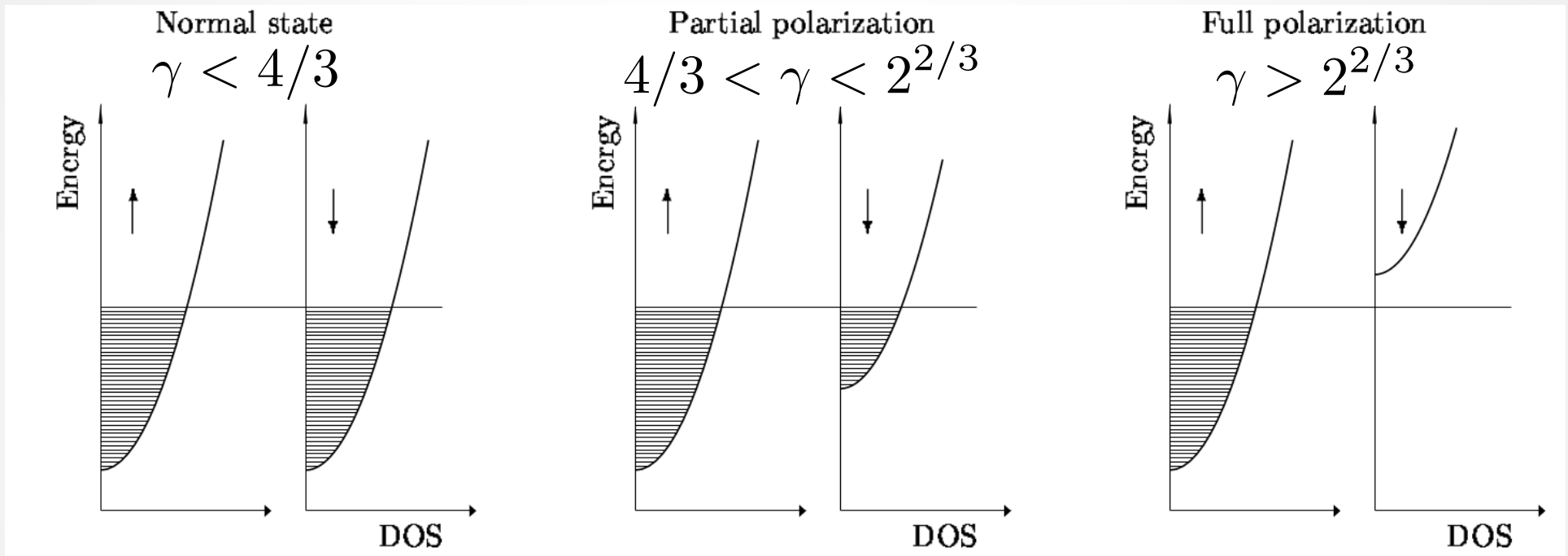
ecuaciones autoconsistentes para obtener:

$$\gamma M = (1 + M)^{2/3} - (1 - M)^{2/3}$$

Esta expresión tiene tres tipos de soluciones.

# Teoría de campo medio

## Modelo de Stoner



- Estado paramagnético (normal):  $\gamma < 4/3$ .
- Ferromagnetismo débil (polarización parcial):  $4/3 < \gamma < 2^{2/3}$ .
- Ferromagnetismo fuerte (polarización total):  $\gamma > 2^{2/3}$ .



Fin de la clase

**¡Muchas gracias!**