

## TEMA 1: ORIGEN Y TIPOS DE MAGNETISMO

Tema 1a: Aspectos previos

Tema 1b : Origen del Momento Magnético.

Tema 1c: Electrones localizados: Paramagnetismo de Curie y Diamagnetismo orbital

Tema 1d: Magnetismo Intenso

Tema 1e: Electrones itinerantes: Magnetismo en metales

### Tema 1e:

- Electrones deslocalizados: magnetismo de bandas.
- Paramagnetismo de Pauli.
- Desdoblamiento espontáneo de las bandas: criterio de Stoner.
- Ferromagnetismo de bandas: valor del  $\mu_{atm}$

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, green, serif font. The '99' is significantly larger and more prominent than 'Cartagena'. The text is set against a light blue and white background with a subtle wave-like pattern.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

## TIPOS DE MAGNETISMO

- La descripción del magnetismo en los sólidos depende de si los  $e^-$ :
  1. **Están localizados en los núcleos iónicos** (“ion cores”):
    - Paramagnetismo de Curie ( $\chi \sim 1/T$ ).
    - Diamagnetismo orbital.
    - Ferromagnetismo de electrones localizados.
  2. **Están deslocalizados en bandas de energía** ( $e^-$  de conducción o itinerantes):
    - Paramagnetismo de Pauli (independiente de  $T$ ).
    - Diamagnetismo de Landau (los  $e^-$  libres describen órbitas ciclotrónicas).
    - Ferromagnetismo de bandas.
  
- Hasta ahora  $\Rightarrow$  Las propiedades magnéticas de los sólidos se han definido en términos de momentos magnéticos localizados.
- En metales los  $e^-$  de conducción están deslocalizados y se mueven más o menos libremente por el cristal  $\rightarrow$  **“Electrones itinerantes o deslocalizados”**. **“Gas de electrones”**.
  - $\triangleright$  En algunos casos los momentos magnéticos están asociados con los  $e^-$  de conducción  $\rightarrow$  Fe, Co, Ni  $\rightarrow$  **Ferromagnetismo de bandas**.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# ELECTRONES DESLOCALIZADOS: MAGNETISMO DE BANDAS

	Iones libres											
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
3d	0	0	1	2	3	5	5	6	7	8	10	10
4s	1	2	2	2	2	1	2	2	2	2	1	2
3d+4s	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

## Átomos en sólidos: Predicciones con las reglas de Hund + Campo Cristalino

$$M_o = n\mu_{z,max} \text{ con } \mu_{z,max} = g_J\mu_B J = \mu_{sat}$$

**Fe**

$$S=J=2 \quad L=0$$

$$g_J = g_s = 2$$

$$\mu_{sat,Fe,teor} = 4\mu_B$$

**Co**

$$S=J=3/2 \quad L=0$$

$$g_J = g_s = 2$$

$$\mu_{sat,Co,teor} = 3\mu_B$$

**Ni**

$$S=J=1 \quad L=0$$

$$g_J = g_s = 2$$

$$\mu_{sat,Ni,teor} = 2\mu_B$$

**Fe**

Sin apagar L:

$$S=L=2; J=4; g_J = 3/2$$

$$\mu_{sat,Fe,teor} = 6\mu_B$$

## Átomos en sólidos: medidas experimentales

$$\mu_{sat,Fe} = 2,2\mu_B$$

$$\mu_{sat,Co} = 1,7\mu_B$$

$$\mu_{sat,Ni} = 0,6\mu_B$$

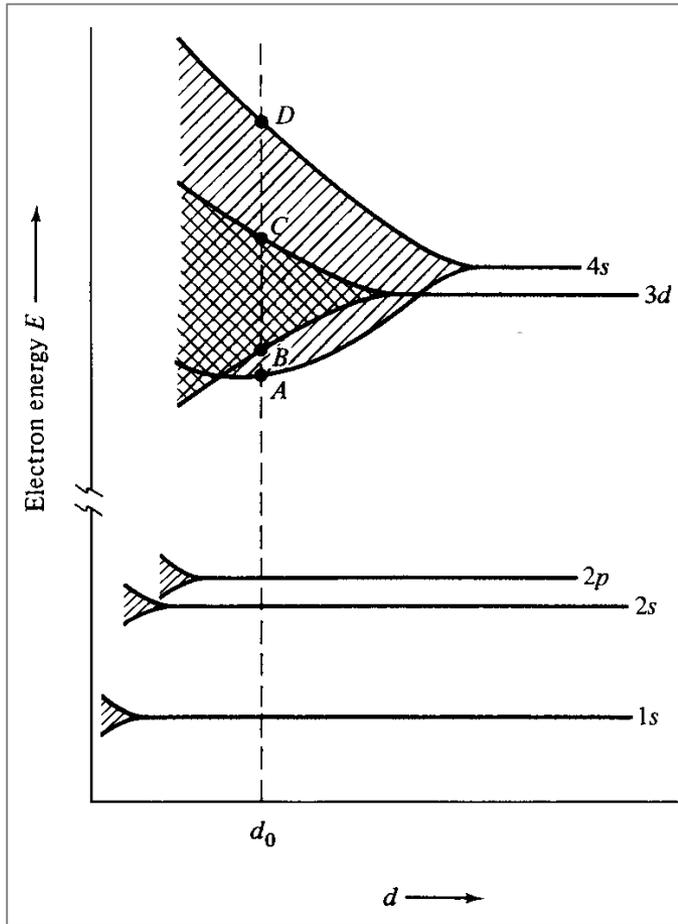
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# ELECTRONES DESLOCALIZADOS: MAGNETISMO DE BANDAS



- Como consecuencia del Principio de exclusión de Pauli, cuando los átomos se acercan para formar un sólido, sus orbitales se solapan  $\Rightarrow$  Desdoblan sus niveles de energía.

- Si N átomos se acercan, cada nivel en el átomo libre se desdobra en N:

Ej. 55,85 g de Fe hay  $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$  átomos  $\rightarrow 6,023 \cdot 10^{23}$  niveles energéticos.



## BANDAS DE ENERGÍA

- La extensión del desdoblamiento es distinta para los distintos niveles.
- La separación energética entre niveles es muy pequeña  $\Rightarrow$  Hablamos de “**Densidad de estados,  $D(E)$** ”.

- Def  $\Rightarrow D(E)$  es el nº de estados electrónicos en cada intervalo de energía y de volumen. Unidad  $m^{-3}J^{-1}$ .

- $D(E)dE$  = densidad de estados de un solo  $e^-$  en el rango de energía entre  $E$  y  $E + dE$ .

- La capacidad de la banda:

$$n_e = \int D(E)dE$$



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

solaparse para formar una banda ancha 4s. Después los

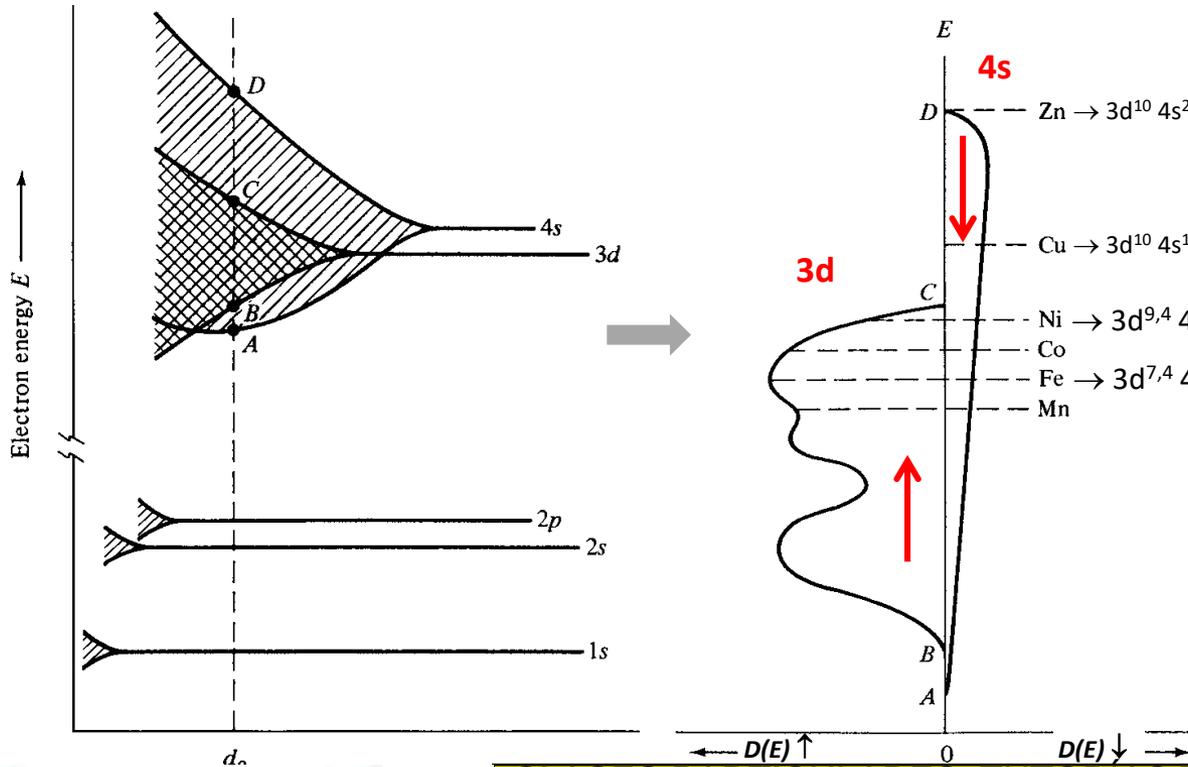
agrupados en un grupo más responsable de la información

Superficie de Fermi en el modelo de  $e^-$  libres

# ELECTRONES DESLOCALIZADOS: MAGNETISMO DE BANDAS

## Forma de las bandas

- El cálculo de la forma de la banda (**forma de la curva  $D(E)$  vs  $E$** ), es muy complicado pero es determinante.



**Bandas estrechas tienen mayor  $D(E) \Rightarrow$  los estados estando están más juntos.**

**Anchura de banda  $\sim \frac{1}{D(E)}$**

**El área debajo de la curva  $D(E)$  vs  $E$  es igual al nº total de estados en una banda.**

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



átomos en el cristal.

nivel de ocupación para cada

Forma de las bandas 3d del Ni

## PARAMAGNETISMO DE PAULI

- A  $\vec{B} = 0$  en cada sub-banda up y down se colocan  $n_e/2$  electrones  $\Leftrightarrow n_{e\uparrow} = n_{e\downarrow}$

$$\Downarrow$$

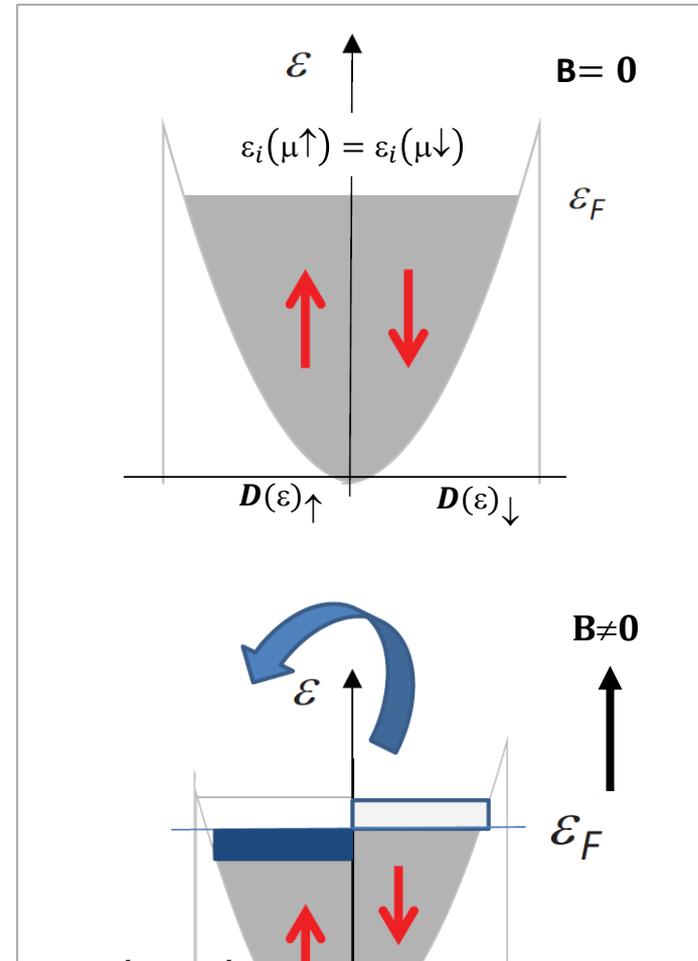
$$M = (n_{e\uparrow} - n_{e\downarrow})\mu_B = 0$$

$n_e$ : nº de  $e^-$  de conducción en la unidad de volumen.

- Cuando se aplica un campo, la energía de los  $e^-$  cercanos al nivel de Fermi, es aumentada o disminuida dependiendo de su espín  $\uparrow$  o  $\downarrow \Rightarrow \exists$  una susceptibilidad paramagnética débil del gas de  $e^-$  conocida como **Paramagnetismo de Pauli**.
- Despreciamos la contribución orbital ( $L=0$ )  $\Rightarrow g=2$  y asumimos que  $\mu_e \sim \mu_B$ .
- A  $\vec{B} \neq 0$  el nº extra de  $e^-$  por unidad de volumen con espín up ( $\Delta n_{\uparrow}$ ) = al déficit de  $e^-$  con espín down ( $\Delta n_{\downarrow}$ ):

$$\Delta n_{\uparrow} = \frac{D(\epsilon_F)}{2} \mu_B B$$

$$\Delta n_{\downarrow} = \frac{D(\epsilon_F)}{2} \mu_B B$$



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Sub-bandas up y down con y sin campo

## PARAMAGNETISMO DE PAULI

- **Conclusión:** El efecto del campo magnético es desdoblarse o desplazar las dos sub-bandas de energía up y down en la cantidad:

$$\Delta\varepsilon = 2\mu_B B$$

dando lugar a la aparición de una imanación y a una susceptibilidad paramagnética del gas de  $e^-$  “**Paramagnetismo de Pauli**”:

$$M = D(\varepsilon_F)\mu_B^2 B \rightarrow$$

$$\chi_P = \frac{M\mu_0}{B} = \mu_0\mu_B^2 D(\varepsilon_F)$$

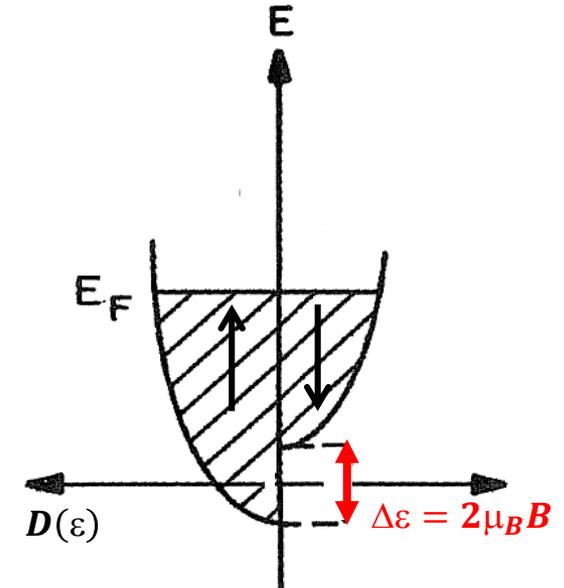
✓  $\chi_P$  aumenta con  $D(\varepsilon_F)$

$$\leftarrow \text{---} D(\varepsilon_F) = \frac{3n_e}{2\varepsilon_F}$$

$$M = \frac{3n_e}{2\varepsilon_F} \mu_B^2 B \rightarrow$$

$$\chi_P = \frac{3n_e\mu_0\mu_B^2}{2\varepsilon_F} = \frac{3n_e\mu_0\mu_B^2}{2k_B T_F}$$

✓  $\chi_P$  es independiente de T



Con  $n_e$ : densidad de  $e^-$  de conducción.

$$(n_e = Z \frac{\rho N_A}{\rho_{atm}} ; Z: \text{valencia})$$

✓  $\chi_P \sim 10^{-5} - 10^{-6} \Rightarrow$  Efecto débil: sólo una pequeña fracción de átomos con energía cercana a

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

## PARAMAGNETISMO DE PAULI

Metal	Electron concentration, in $\text{cm}^{-3}$	Radius <sup>a</sup> parameter $r_s$	Fermi wavevector, in $\text{cm}^{-1}$	Fermi velocity, in $\text{cm s}^{-1}$	Fermi energy, in eV	Fermi temperature $T_F = \epsilon_F/k_B$ , in deg K
Li	$4.70 \times 10^{22}$	3.25	$1.11 \times 10^8$	$1.29 \times 10^8$	4.72	$5.48 \times 10^4$
Na	2.65	3.93	0.92	1.07	3.23	3.75
K	1.40	4.86	0.75	0.86	2.12	2.46
Rb	1.15	5.20	0.70	0.81	1.85	2.15
Cs	0.91	5.63	0.64	0.75	1.58	1.83
Cu	8.45	2.67	1.36	1.57	7.00	8.12
Ag	5.85	3.02	1.20	1.39	5.48	6.36
Au	5.90	3.01	1.20	1.39	5.51	6.39
Be	24.2	1.88	1.93	2.23	14.14	16.41
Mg	8.60	2.65	1.37	1.58	7.13	8.27
Ca	4.60	3.27	1.11	1.28	4.68	5.43
Sr	3.56	3.56	1.02	1.18	3.95	4.58
Ba	3.20	3.69	0.98	1.13	3.65	4.24
Zn	13.10	2.31	1.57	1.82	9.39	10.90
Cd	9.28	2.59	1.40	1.62	7.46	8.66
Al	18.06	2.07	1.75	2.02	11.63	13.49
Ga	15.30	2.19	1.65	1.91	10.35	12.01
In	11.49	2.41	1.50	1.74	8.60	9.98

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

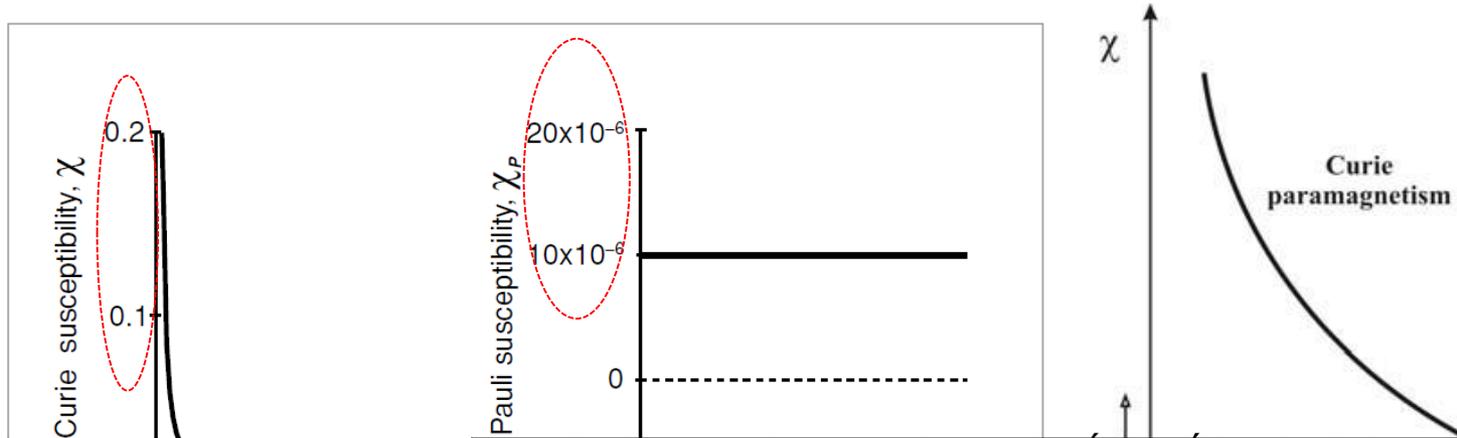
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

## COMPARACIÓN PARAMAGNETISMO DE PAULI Y DE LANGEVIN

- Langevin ( $e^-$  localizados)  $\rightarrow M_{loc}(T, B) = \frac{n\mu_{ef}^2 B}{3k_B T}$
- Pauli ( $e^-$  deslocalizados)  $\rightarrow M_{desloc}(B) = \frac{3n_e \mu_B^2 B}{2k_B T_F}$ 
  - ✓ Independiente de T
  - ✓  $T_F \sim 10^4$  K

$$\frac{M_{loc}}{M_{desloc}} \sim \frac{T_F}{T}$$

$T_F \gg T \rightarrow$  Para metales a temperaturas ordinarias la contribución de los  $e^-$  de conducción es pequeña con respecto a los  $e^-$  ligados.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

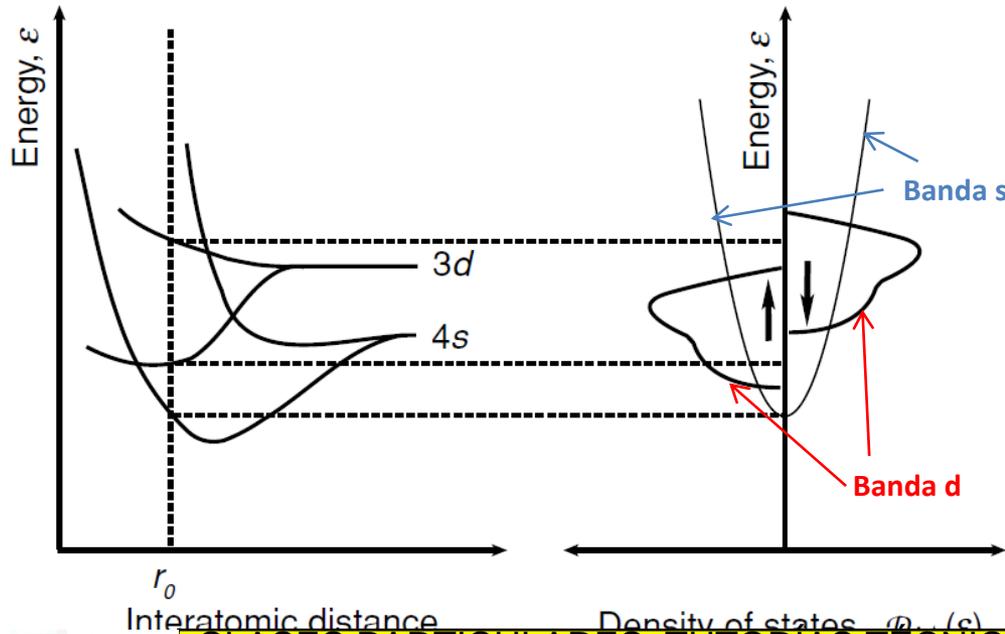
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

## DESDOBLAMIENTO ESPONTÁNEO DE BANDAS: CRITERIO DE STONER

¿Es posible que las dos sub-bandas up y down no estén igualmente pobladas a B=0?



¿Es posible que exista imanación espontánea dada por  $M_s = (n_{e\uparrow} - n_{e\downarrow}) \mu_B$  debido al desdoblamiento espontáneo en espín de las dos sub-bandas?



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

## DESDOBLAMIENTO ESPONTÁNEO DE BANDAS: CRITERIO DE STONER

Competición energética en el desdoblamiento espontáneo ( $H_{apl}=0$ ) de sub-bandas:

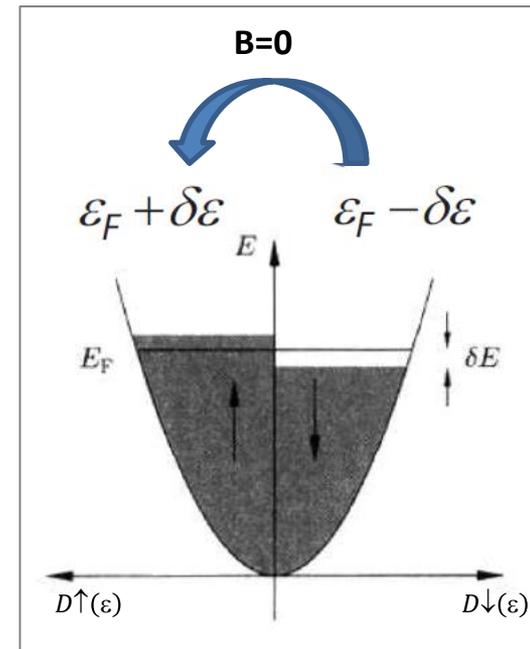
- Disminución de la energía coulombiana si los  $e^-$  rellenan primero los estados con espines paralelos (vestigio de las reglas de Hund intra-atómicas)  $\Rightarrow$  Energía de canje (coulombiana) salvada con ordenamiento  $\uparrow\uparrow$  de los espines.

*Las interacciones de canje interatómicas*

$\varepsilon_{ex}^i = -2J S_i \sum_j S_j$ , producen el desplazamiento de la parte de la banda  $d$  con espín up con respecto a la parte de la banda  $d$  con espín down.

- Incremento de energía cinética que se deriva al poner los  $e^-$  en la banda con espín up debido a que en una banda los estados no están degenerados  $\Rightarrow \exists$  un coste energético que tiende a minimizarse si los espines se emparejan  $\uparrow\downarrow$ .

El coste de energía cinética es  $\sim$  a la anchura de banda  $\sim 1/D(\varepsilon_F)$



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# DESDOBLAMIENTO ESPONTÁNEO DE BANDAS: CRITERIO DE STONER

El ferromagnetismo, o imanación espontánea, sucederá Si:

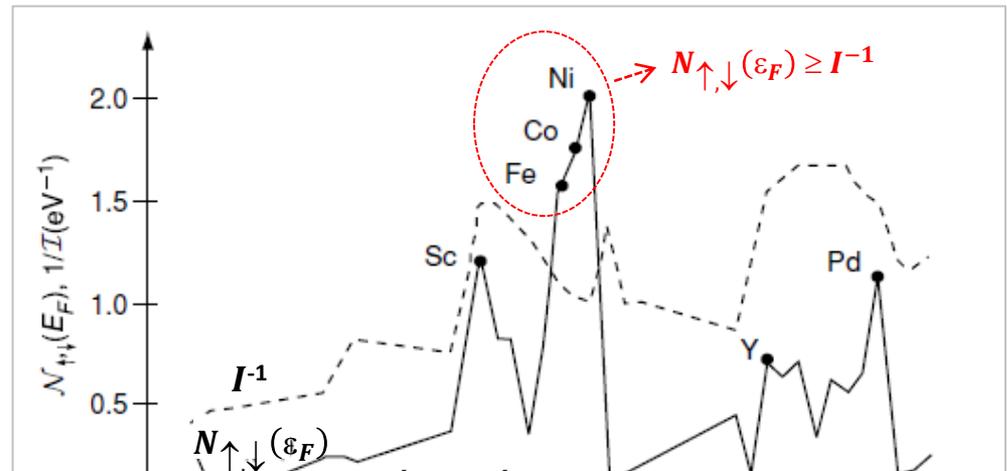


$$J \cdot D(\epsilon_F) \geq 1 \quad \Leftrightarrow \quad I \cdot N_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_F) \geq 1$$

**Criterio de Stoner**

Con  $I$  el **parámetro de canje de Stoner** ( $I = 2n_e J$ ) y  $N_{\uparrow, \downarrow}(\epsilon_F) = \frac{D(\epsilon_F)}{2n_e}$  la densidad de estados por átomo para cada estado de espín.  $I \sim 1$  eV en materiales FM 3d.

- ✓ Si  $\exists$  una alta  $D(\epsilon_F)$  y fuertes interacciones de canje (fuertes efectos de Coulomb)  $\Rightarrow$  se vuelve energéticamente favorable para la banda desdoblarse y el metal se vuelve espontáneamente FM.
- ✓ Si existe FM espontáneo, las bandas con espín  $\uparrow$  y espín  $\downarrow$  han de estar desdobladas a  $H_{apl} = 0$  en una energía



**Cartagena99**

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

En el momento de bandas,  $m$  es debido al desdoblamiento espontáneo en espín de las sub-bandas.

## FERROMAGNETISMO DE BANDAS: VALOR DEL $\mu_{atm}$

El valor de  $\mu_{sat,Fe} = 2,2\mu_B$  no se explica en el marco de los átomos con momentos localizados  $\Rightarrow$  es una fuerte evidencia del FM de bandas o itinerante en el cual la imanación es debida al desdoblamiento espontáneo en espín de las bandas.

✓ **Ion libre  $Fe^{2+}$ :** (Ar)  $3d^64s^2 \rightarrow 4 e^-$  desapareados  $\Rightarrow \mu_{z,max} = 4\mu_B$  ( $\mu_{exp} = 2,2\mu_B$ )

✓ **Ion  $Fe^{2+}$  en el sólido (Fe metálico con estructura bcc ( $\alpha$ -Fe)):**

- Bandas 4s y 3d solapadas  $\Rightarrow$  Tiene lugar una transferencia de carga desde 4s  $\rightarrow$  3d.

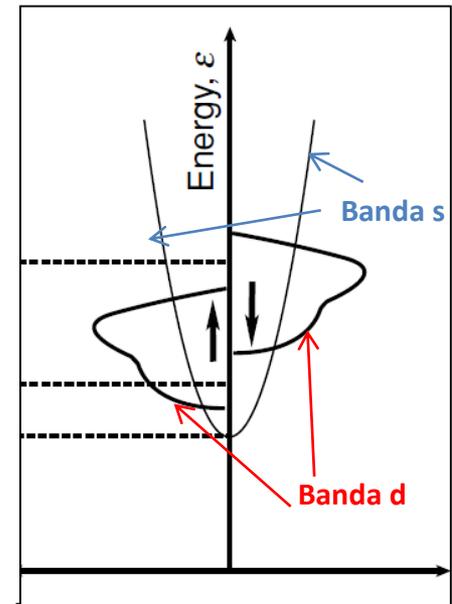


Medidas de transporte  $\Rightarrow 4s^{0,6} \Rightarrow 3d^{7,4}$

- La banda estrecha 3d tiene una tendencia a desdoblarse espontáneamente para formar un estado FM a  $T < T_C$ .



$3d^{\uparrow 4.8} \quad 3d^{\downarrow 2.6}$



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

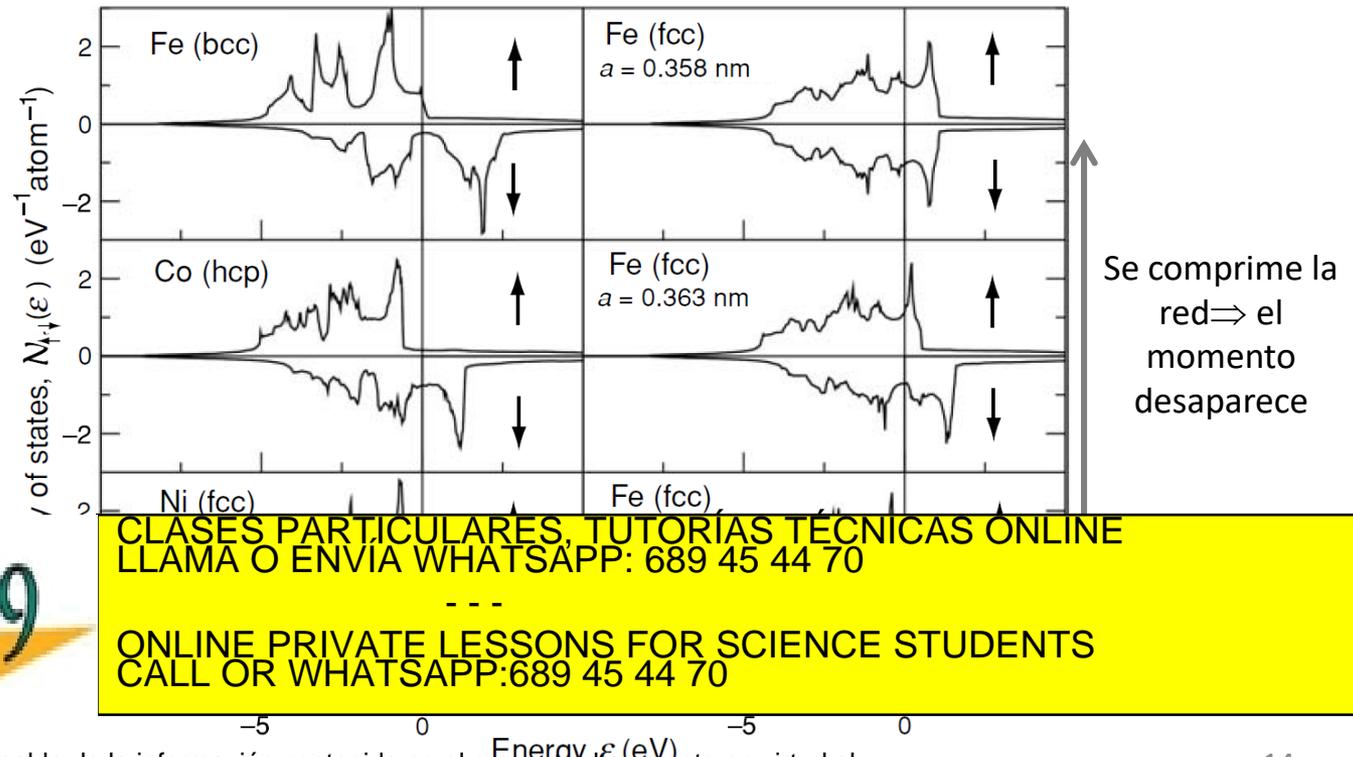
## FERROMAGNETISMO DE BANDAS: VALOR DEL $\mu_{atm}$

La naturaleza del enlace químico, y por tanto el carácter del magnetismo, depende críticamente de la estructura del cristal y de su composición.

Table 3.5. Atomic moments of iron in different crystalline environments, in units of $\mu_B$					
$\gamma$ -Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	$\alpha$ -Fe	YFe <sub>2</sub>	$\gamma$ -Fe	YFe <sub>2</sub> Si <sub>2</sub>	FeS <sub>2</sub>
Ferrimagnet	Ferromagnet	Ferromagnet	Antiferromagnet	Pauli paramagnet	Diamagnet
5.0	2.2	1.45	unstable	0	0

**Figure 5.15**

Densities of states for some elements in the ferromagnetic state. Fe is a weak ferromagnet, Co and Ni are strong. Results for  $\gamma$ Fe with different lattice parameters illustrate the sensitivity of the Fe moment to lattice parameter in a dense-packed structure. (Calculations courtesy of

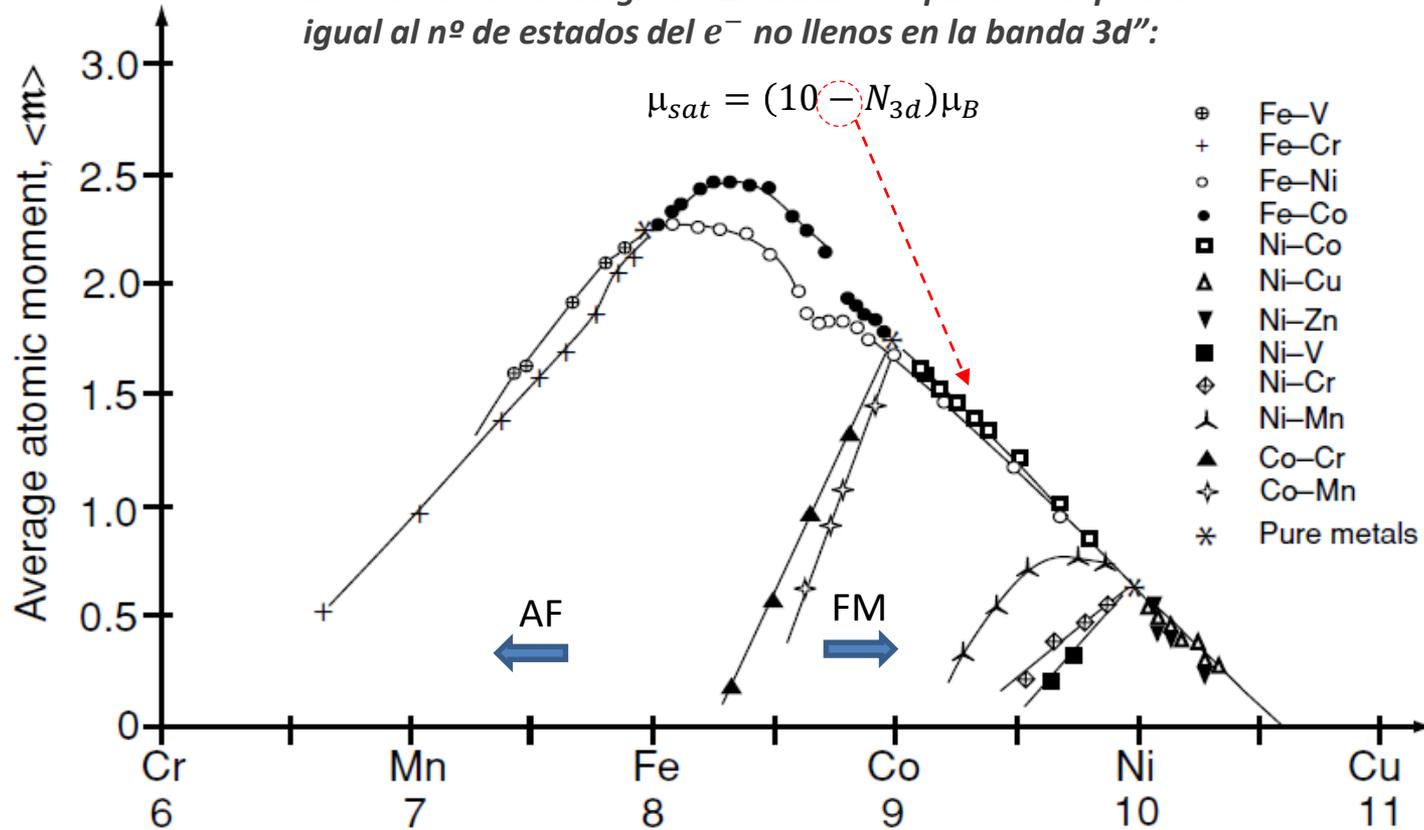


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ---  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# FERROMAGNETISMO DE ALEACIONES

*Modelo de banda rígida: "El máximo espín no compensado es igual al nº de estados del e<sup>-</sup> no llenos en la banda 3d":*



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

## FERROMAGNETISMO DE BANDAS: VALOR DEL $\mu_{atm}$

**Conclusión: ¿Qué criterios se deben satisfacer para la existencia de FM en metales?**

1. Los  $e^-$  responsables tienen que estar en una banda parcialmente llena con el fin de que haya niveles de energía vacantes disponibles para que los  $e^-$  con espines desapareados se muevan a ellos.



*Los  $e^-$  del núcleo interior del átomo quedan descartados*

2. La densidad de niveles en la banda tiene que ser alta, para que el incremento de la energía causado por el alineamiento de los espines sea pequeño.

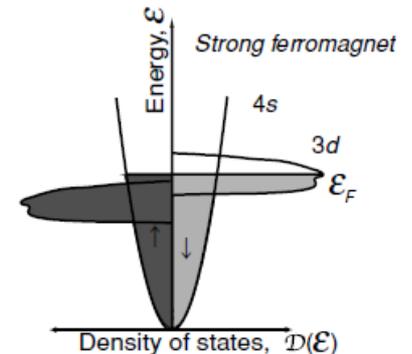
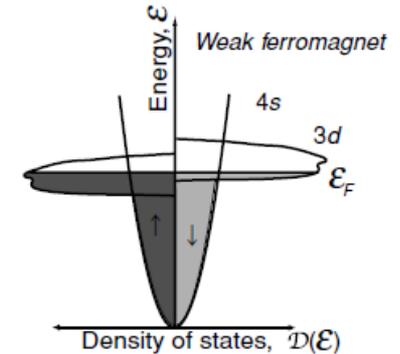


*Los  $e^-$  de la banda de valencia (baja densidad) quedan descartados.*

3. Los átomos tienen que estar separados a la distancia adecuada para que la fuerza de canje consiga que los espines de los  $e^- d$  en un átomo se alineen con los espines de los átomos vecinos.



*De todos los elementos de transición que cumplen 1 y 2 solo el Fe, Co y Ni cumplen 3.*



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70