

MECANICA CUANTICA 2

LECTURA # 18

LA INTERACCION DE INTERCAMBIO

Consideremos el átomo de Helio y despreciemos los efectos magnéticos.

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{\hat{r}_1} - \frac{Ze^2}{\hat{r}_2} + \frac{e^2}{\hat{r}_{12}} \quad \hat{r}_{12} \equiv |\hat{r}_{12}| \quad \hat{Y}_{1,2} = \hat{Y}_1 - \hat{Y}_2$$

En un principio no tengamos en cuenta el término de interacción entre los dos electrones $\rightarrow \frac{e^2}{\hat{r}_{12}}$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2)$$

$$\hat{H}(i) = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{\hat{r}_i}$$

$$\hat{H}(1) |\psi_r^{(1)}\rangle = E_r |\psi_r^{(1)}\rangle \quad "r" = n, l, m$$

$$\hat{H}(2) |\psi_s^{(2)}\rangle = E_s |\psi_s^{(2)}\rangle \quad "s" = n, l, m$$

$$|\Psi\rangle = |\psi_r^{(1)}\rangle |\psi_s^{(2)}\rangle$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) \Rightarrow \hat{H}_0 |\Psi\rangle = (E_r + E_s) |\Psi\rangle$$

$$|\Psi'\rangle = |\psi_s^{(1)}\rangle |\psi_r^{(2)}\rangle$$

$$\hat{H}_0 |\Psi'\rangle = (E_s + E_r) |\Psi'\rangle$$

$$\Rightarrow |\Psi_{rs}\rangle = a |\psi_r^{(1)}\rangle |\psi_s^{(2)}\rangle + b |\psi_s^{(1)}\rangle |\psi_r^{(2)}\rangle \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

Por el momento vamos a olvidarnos de argumentos relacionados con partículas idénticas.

Ahora consideremos $\hat{W}(1,2) = \frac{e^2}{\hat{r}_{12}}$ y tratemosla como una perturbación.

El Hamiltoniano posee una perturbación de orden 2 debido a los dos electrones (esto sin considerar la degeneración propia del sistema núcleo-electrón).

$$\Rightarrow \hat{H}_0 \rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad \hat{W} = \lambda \hat{H}_1$$

$$E_0 = E_r + E_s. \text{ La perturbación nos llevará al caso } E = E_0 + \Delta E$$

Aplicando teoría de perturbaciones a primer orden en el caso degenerado \rightarrow

$$\begin{vmatrix} W_{11} - \Delta E & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} - \Delta E \end{vmatrix} = 0$$

$$W_{11} = \langle \psi_r^{(1)} | \langle \psi_s^{(2)} | \hat{W}(1,2) | \psi_s^{(2)} \rangle | \psi_r^{(1)} \rangle \equiv K$$

$$W_{22} = \langle \psi_s^{(1)} | \langle \psi_r^{(2)} | \hat{W}(1,2) | \psi_r^{(2)} \rangle | \psi_s^{(1)} \rangle = W_{11} = K$$

$$W_{12} = W_{21} = \langle \psi_r^{(1)} | \langle \psi_s^{(2)} | \hat{W}(1,2) | \psi_r^{(2)} \rangle | \psi_s^{(1)} \rangle \equiv J$$

$$K = e^2 \int \frac{|\psi_r(\vec{r}_1)|^2 |\psi_s(\vec{r}_2)|^2}{r_{12}} d^3r_1 d^3r_2 \quad \leftarrow \text{Energía directa o de Coulomb}$$

$$J = e^2 \int \frac{\psi_r^*(\vec{r}_1) \psi_s(\vec{r}_1) \psi_s^*(\vec{r}_2) \psi_r(\vec{r}_2)}{r_{12}} d^3r_1 d^3r_2 \quad \leftarrow \text{Energía de intercambio}$$

$$\begin{vmatrix} K - \Delta E & J \\ J & K - \Delta E \end{vmatrix} = 0 \quad \rightarrow \quad (K - \Delta E)^2 - J^2 = 0 \Rightarrow (K - \Delta E)^2 = J^2 \Rightarrow K - \Delta E = \pm J$$

$$\Delta E = K \pm J$$

$$\begin{pmatrix} K - \Delta E & J \\ J & K - \Delta E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

$$\Delta E = K + J \Rightarrow \begin{pmatrix} -J & J \\ J & -J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}; b = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\psi_r^{(1)}\rangle |\psi_s^{(2)}\rangle + |\psi_s^{(1)}\rangle |\psi_r^{(2)}\rangle \} \quad \leftarrow \text{Simétrica.}$$

$$\Delta E = K - J \Rightarrow \begin{pmatrix} J & J \\ J & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}; b = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|\Psi\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\psi_r^{(1)}\rangle |\psi_s^{(2)}\rangle - |\psi_s^{(1)}\rangle |\psi_r^{(2)}\rangle \} \quad \leftarrow \text{Antisimétrica.}$$

Ahora debemos tener en cuenta que las dos partículas son idénticas, dos electrones de spin $1/2$, es decir un sistema fermiónico, cuya función de onda total debe ser antisimétrica.

Debemos agregar una parte de la función de onda correspondiente a spin.

$$1/2 \otimes 1/2 \Rightarrow S = 0, 1$$

$$|S=0, M=0\rangle \rightarrow \text{antisimétrico}$$

$$|S=1, M\rangle \rightarrow \text{simétrico}$$

$$\Rightarrow |\Psi_1\rangle = |\Psi_+\rangle |S=0, M=0\rangle \rightarrow E_1 = E_0 + K + J \quad \leftarrow \text{Parahelio}$$

$$|\Psi_2\rangle = |\Psi_-\rangle \sum_{M=-1}^1 c_M |S=1, M\rangle \rightarrow E_2 = E_0 + K - J \quad \leftarrow \text{Ortohelio}$$

En el caso del Helio $J > 0 \Rightarrow E_1 > E_2 \Rightarrow |\Psi_2\rangle$, es decir, el ortohelio, está favorecido energéticamente.

FERROMAGNETISMO

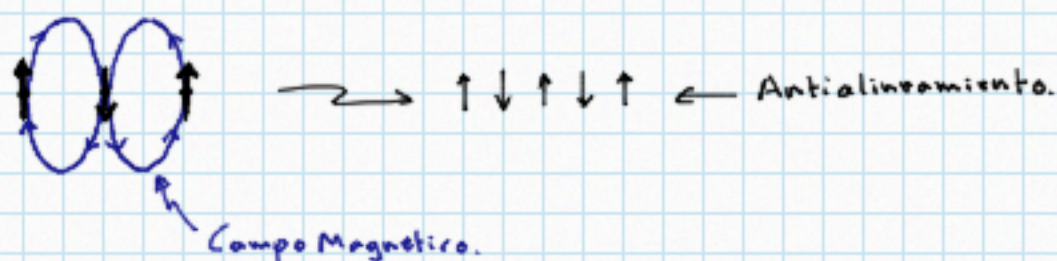
Es importante notar q K y J tienen origen electrostático $\Rightarrow |K|, |J| \sim 10 \text{ eV}$

La interacción magnética entre spins (momentos dipolares magnéticos) es $\vec{\mu}_{e_1} \cdot \vec{\mu}_{e_2} \sim 10^{-2} \text{ eV}$, es decir, tres ordenes de magnitud mas pequeña

En conclusión, la interacción entre spins a este nivel está regida por los potenciales directo y de intercambio K, J , que son de origen electrostático ($\sim \frac{e^2}{r}$)

El caso de J no posee analogo clásico, es un potencial netamente cuántico asociado a la indistinguibilidad entre los dos electrones.

Consideremos los momentos magnéticos de átomos individuales en un material. De la interacción magnética una esperaría:



Sin embargo, como ya dijimos, los efectos magnéticos son despreciables comparados con los efectos electrostáticos provenientes de los potenciales K, J .

Consideremos la interacción entre dos átomos i, j en un material. Supongamos que el potencial electrostático entre ellos es $U_{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Rightarrow$

$$K_{ij} = \int \psi_i^*(\vec{r}_1) \psi_j^*(\vec{r}_2) U_{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_i(\vec{r}_1) \psi_j(\vec{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \leftarrow \text{Potencial directo}$$

$$J_{ij} = \int \psi_i^*(\vec{r}_1) \psi_j^*(\vec{r}_2) U_{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_i(\vec{r}_2) \psi_j(\vec{r}_1) d^3r_1 d^3r_2 \leftarrow \text{Potencial de intercambio}$$

Estos potenciales son debidos a la interacción entre electrones de valencia en los átomos i, j y suelen tener valores significativos solamente para primeros vecinos.

Dependiendo de $U_{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, que a su vez depende de la estructura electrónica de los átomos en cuestión, tenemos:

$$J_{ij} > 0$$

$$J_{ij} = 0$$

$$J_{ij} < 0$$

Ahora, las energías para el sistema son: $E_{ij}^1 = (E_0 + K_{ij}) + J_{ij} \rightarrow |S=0, M=0\rangle$

$$E_{ij}^2 = (E_0 + K_{ij}) - J_{ij} \rightarrow |S=1, M\rangle$$

Si $J_{ij} > 0 \Rightarrow |S=1, M\rangle$ es favorecido $\rightarrow \uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow \leftarrow$ Favorecidos \rightarrow Ferromagnetismo.

Si $J_{ij} < 0 \Rightarrow |S=0, M=0\rangle$ es favorecido $\rightarrow \uparrow\downarrow \leftarrow$ Anti alineamiento \rightarrow antiferromagnetismo

Una forma efectiva de describir la interacción entre spins en un material ferromagnético o antiferromagnético es:

$E_{ij} \sim 2J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \leftarrow$ Potencial de intercambio de Heisenberg.

Si tomamos solamente primeros vecinos $\Rightarrow J_{ij} = J \Rightarrow E \sim -2J \sum_{\text{vecinos}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \leftarrow$ Modelo Ising.