

RESISTIVIDAD DE MATERIALES FERROMAG-
NETICOS.

Lidia Segre P.

Facultad de Ciencias
Universidad de Chile



1969.

06320

UNIVERSIDAD DE CHILE
SEDE SANTIAGO ORIENTE
BIBLIOTECA CENTRAL

Física
S 455
1969

RESISTIVIDAD DE MATERIALES FERROMAGNETICOS

En este trabajo estudiaremos el scattering elástico de electrones de baja energía en un cristal magnético para analizar la contribución a la resistividad y, en particular, nos interesa encarar el caso de scattering con paredes de Bloch.

TEORIA DE LOS DOMINIOS FERROMAGNETICOS Y PAREDES DE BLOCH .

Orden Ferromagnético.

Para analizar el comportamiento de un material bajo acción de un campo magnético externo es necesario definir ciertos conceptos.

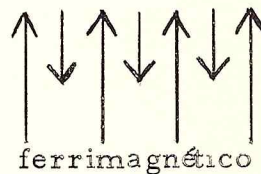
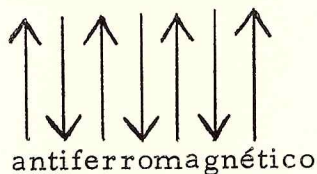
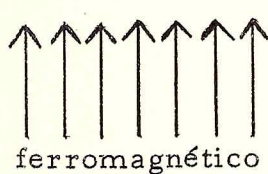
Se llama magnetización M al momento magnético por unidad de volumen.

La susceptibilidad magnética por unidad de volumen se define por $X = M / H$ donde H es el campo magnético aplicado.

A los materiales con susceptibilidad magnética negativa se les llama diamagnéticos y a los de susceptibilidad magnética positiva, paramagnéticos.

Las distintas ordenaciones de los momentos magnéticos dan lugar a materiales ferromagnéticos, ferrimagnéticos, antiferromagné-

ticos, etc. como se ve en la figura



La aplicación de un campo magnético en un material provoca distintos comportamientos. Si se calcula el promedio estadístico de la magnetización resultante $\langle M \rangle$ se distinguen 3 casos :

- 1) $\langle M \rangle$ es paralela al campo aplicado y su magnitud es proporcional a el, se hace cero cuando se deja de aplicarlo. Esta es la descripción de material paramagnético.
- 2) $\langle M \rangle$ es proporcional al campo aplicado pero antiparalela. Este comportamiento corresponde a material diamagnético.
- 3) $\langle M \rangle$ tiene un valor finito pero es independiente del campo aplicado en el límite en que éste se hace 0 . Este es el caso de material ferromagnético.

Este último tiene un momento magnético espontáneo debido a que los spines y los momentos magnéticos de los electrones están distribuidos de manera regular.

Consideremos un material paramagnético con una concentración de N iones de spin S . Suponiendo una interacción interna que tienda a alinear los momentos magnéticos paralelos unos a otros obtenemos un material ferromagnético. Postulemos tal interacción y llamémosla campo de intercambio. Al efecto de orientación del campo de intercambio se opone la agitación térmica y para temperaturas elevadas el orden de spin se destruye.

Se define la temperatura de Curie T_c como la temperatura tal que por encima de ella se destruye la magnetización espontánea. Esta separa la fase paramagnética desordenada para $T > T_c$ de la fase ferromagnética ordenada para $T < T_c$.

El campo de intercambio da una representación aproximada de la interacción de intercambio mecánico-cuántica.

Con ciertas suposiciones se puede mostrar que la energía de interacción de los átomos i, j con spines S_i, S_j contiene un término

$$U = -2 J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

donde J es la integral de intercambio y está relacionada a la superposición de distribución de carga de los átomos i, j .

La energía de intercambio no tiene análogo clásico, pero es de origen electrostático. Expresa la diferencia en la energía de interacción de Coulomb entre estados con spin paralelo y estados con spin antiparalelo. Por el principio de exclusión de Pauli no se puede cambiar las direcciones relativas de 2 spines sin cambiar la distribución de carga espacial.

La integral de intercambio está definida por la siguiente expresión

$$J = \int \psi_{m_i}^*(\vec{r}_1) \psi_{m_i}(\vec{r}_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_{m_j}^*(\vec{r}_2) \psi_{m_j}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

por ejemplo aplicada a 2 electrones, las funciones de onda corresponden a los 2 electrones con coordenadas r y r' y números cuánticos principales n y n' .

Hay algunas similitudes entre las excitaciones elementales de un material ferromagnético y las de un sólido elástico. En este último, si un átomo es desplazado de su posición de equilibrio, comienza a oscilar con el movimiento y la frecuencia asociados a los osciladores armónicos o modos normales del cristal. Al cuantizar las amplitudes de los modos normales se obtienen los cuantos llamados fonones.

Los modos normales análogos, en materiales con una estructura magnética ordenada son las ondas de spin. Cuando se tiene en cuenta la naturaleza mecánico-cuántica de los spines se obtienen los cuantos llamados en este caso magnones.

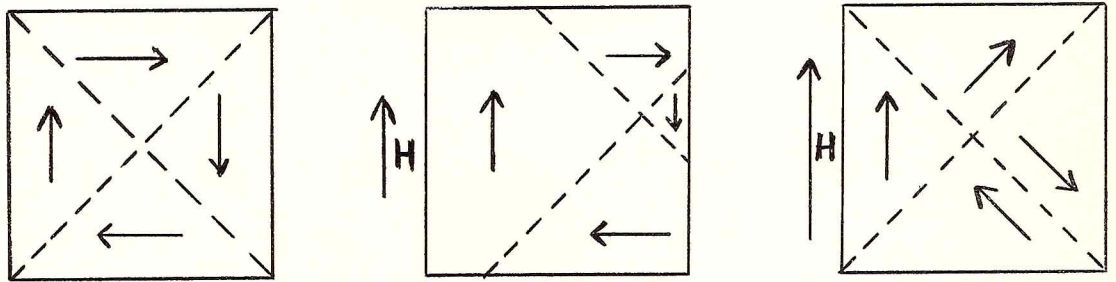
La validez de las nociones de ondas de spin, y magnones están restringidas, tanto como la de vibraciones de la red y fonones, a movimientos de amplitudes pequeñas.

A temperaturas muy inferiores al punto de Curie los momentos magnéticos electrónicos de un material ferromagnético están todos esencialmente alineados cuando se los mira a escala microscópica.

Mirando la muestra como un todo, el momento magnético puede ser mucho menor que el momento de saturación y la aplicación de un campo magnético externo puede saturar la muestra. Weiss explicó este comportamiento suponiendo que las muestras están compuestas por un número pequeño de regiones llamadas dominios, en las cuales la magnetización local está saturada en cada una de ellas. Las direcciones de magnetización de los diferentes dominios no son necesariamente paralelas. El aumento de momento magnético de la muestra bajo acción de un campo magnético aplicado se debe a 2 procesos independientes:

1) para campos aplicados débiles, el volumen de los dominios que están favorablemente orientados con respecto al campo, aumentan a expensas de los que están orientados desfavorablemente.

2) para fuertes campos aplicados la magnetización rota hacia la dirección del campo.

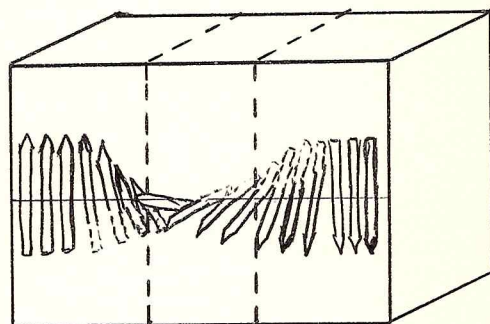


Hay una energía en los cristales ferromagnéticos que dirige la magnetización según ciertos ejes cristalográficos definidos llamados direcciones de fácil magnetización. Esta energía es llamada energía anisotrópica.

Un origen de esta energía es el siguiente: la magnetización del cristal ve la red cristalina a través de la superposición orbital de los electrones; el spin interactúa con el movimiento orbital por medio del acoplamiento spin orbita y el movimiento orbital a su vez interactúa con la estructura cristalina por medio de los campos electrostáticos y de la superposición de las funciones de onda asociadas con los átomos vecinos de la red.

Una pared de Bloch en un cristal es la capa de transición que separa dominios adyacentes -magnetizados en diferentes direc-

ciones. El cambio entero en la dirección de spin entre los dominios no ocurre en un salto discontinuo a través de un simple plano atómico sino que se produce en forma gradual sobre varios planos atómicos. La energía de intercambio es menor cuando el cambio es distribuído sobre varios spines. Los spines dentro de la pared están dirigidos en todas direcciones, es decir no sólo según los ejes de fácil magnetización, luego hay una energía anisotrópica asociada a la pared aproximadamente proporcional al espesor.



Landau y Lifshitz mostraron que la estructura de dominios es una consecuencia natural de las varias contribuciones a la energía (de intercambio, anisotrópica, magnética) de un material ferromagnético.

La estructura de dominios tiene siempre su origen en la posibilidad de disminuir la energía del sistema yendo de una configuración saturada con alta energía de magnetización, a una configuración de dominio con baja energía.

SCATTERING DE ELECTRONES EN MATERIAL FERROMAGNETICO.

Uno de los modelos más comunes y simples que se le asocia a un material ferromagnético es el siguiente: es un conjunto de momentos magnéticos correspondientes a los electrones no apareados de las capas 3d de los átomos del cristal localizados en

los puntos de la red y un mar de electrones libres de las capas 4 S que son los responsables de la conducción eléctrica.

Los electrones de la capa 3d están cerca del núcleo y se ejercen sobre ellos fuerzas de ligadura mucho mas fuertes que sobre los de la capa 4s.

El estudio de la interacción S-d es nuestro principal objetivo ya que esta interacción contribuye a la resistividad eléctrica. La resistividad de un metal es debida al desorden existente en la red cristalina; los electrones de conducción perciben de varias maneras cualquier deformación de la red periódica ideal de los iones positivos.

El desorden puede deberse por ejemplo, a colisiones de los electrones de conducción con fonones de la red, con átomos de impureza, con imperfecciones mecánicas de la red y a movimientos térmicos de la red.

La resistividad eléctrica de los metales de transición consiste de 2 partes: una es la resistividad que viene de la interacción electrón fonón, y la otra llamada anómala que es mayor en general que la primera hasta el punto de Curie.

En la región de temperatura por debajo del punto de Curie el desorden de spin en su orientación, que puede describirse en términos de ondas de spin, da lugar al scattering de los electrones de conducción a través de la interacción S-d y contribuye a la parte anómala de la resistividad.

Kasuya ¹ propuso el hamiltoniano para la interacción S-d

(¹) (Prog. Theor. Phys. 16 (1956) 45)

en segunda cuantización tomando una interacción escalar del tipo

$$- \sum_{m,i} J (\vec{\pi}_i - \vec{R}_m) \vec{s}_i \cdot \vec{S}_m$$

s_i spin del electrón de conducción
 S_n spin de los electrones no apareados

Mannari ² tomando el hamiltoniano de interacción calculado por Kasuya, encontró que para bajas temperaturas las fluctuaciones transversales de la imantación contribuyen a la resistividad proporcionalmente a T^2 .

En otro trabajo Hartmann - Boutron ³ muestra tomando la misma interacción de Kasuya, que el efecto de las fluctuaciones longitudinales de la imantación en la resistividad es despreciable respecto al efecto de las fluctuaciones longitudinales.

Los trabajos de Mannari y Hartmann-Boutron consisten en calcular las probabilidades de transición para los procesos de scattering con el potencial de interacción desarrollado por Kasuya y luego determinar las funciones de distribución de los electrones de conducción a partir de la ecuación de Boltzmann; hay 2 funciones distintas según el spin esté alineado u opuesto a la magnetización.

La resistividad está relacionada a la función de distribución ⁴.

A nosotros nos interesa en particular el scattering de electrones de conducción con electrones magnéticos a través de paredes

(2) (Prog. Theor. Phys. Vol 22 N° 3 (1959) 335)

(3) (Phys der Kond. Mat. Vol 1. 114-1965)

(4) (Ziman - Electrons and Phonons - Oxford 1963 - 283) .

de Bloch, es decir el mismo problema de scattering tratado más arriba, pero en una zona de material ferromagnético con vector de magnetización variable en el espacio.

Hartmann-Boutron ⁵ hizo el cálculo del factor de transmisión de una pared de Bloch para ondas de spin de vector de onda perpendicular a la pared. Demostró que considerando una energía anisotrópica para el material ferromagnético del tipo

$$E = k \operatorname{sen}^2 \alpha$$

$k \sim 10^5$ CGS
 α ángulo que forma la magnetización con un eje de fácil magnetización.

el estudio de la propagación de las ondas de spin de baja energía a través de la pared de Bloch conduce a una ecuación de la forma de Schrödinger en una dimensión en la cual aparece un pozo de potencial que tiene la propiedad de ser completamente transparente para cualquier energía de la onda incidente.

En un trabajo posterior Pick y Saint-James ⁶ demuestran que esta propiedad de transparencia de la pared de Bloch es característica del tipo de energía anisotrópica elegida por Hartmann-Boutron y que para otros tipos de energía anisotrópica no se cumple.

Para estudiar el problema que nos interesa podemos analizar primero el caso más sencillo de scattering elástico de electrones con un material magnético. Debemos luego introducir una iman-

(⁵) . (Academie des Sciences 1961 - 252 - 3955) .

(⁶) (Journal de Physique, Le Radium 1962 pag. 124, Tome 23).

tación variable para tener en cuenta la pared de Bloch.

Planteemos entonces el hamiltoniano de interacción para este caso más simple y veamos qué términos predominan en la amplitud de scattering.

Este cálculo está hecho en el trabajo de Vredevoe y De Wames ⁷ y nosotros lo analizaremos en detalle

El hamiltoniano de interacción para scattering de electrones con un cristal magnético es

$$\begin{aligned}
 H_{int} = & \sum_i V(\vec{r} - \vec{R}_i) + \sum_i G(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{S}_e \cdot \vec{S}_i + \\
 & \vec{\mu}_e \cdot \left\{ \vec{\nabla}_r \times \sum_i \left[\vec{\mu}_i \times \frac{(\vec{r} - \vec{r}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} \right] \right\} + \sum_i \left[\vec{\mu}_i \times \vec{\nabla}_{r_i} \frac{\phi(\vec{r} - \vec{r}_i)}{2e mc} \right] \cdot \vec{P}_e \\
 & + \sum_i \left[\vec{\mu}_e \times \vec{\nabla}_{R_i} \frac{V(\vec{r} - \vec{R}_i)}{2e mc} \right] \cdot \vec{P}_e
 \end{aligned}$$

El 1er término es la interacción de Coulomb entre el átomo en la posición \vec{R}_i y el electrón incidente cuya posición está representada por \vec{r} .

El 2º término es la interacción de intercambio entre el electrón magnético en \vec{r}_i con spin \vec{S}_i y el electrón incidente con spin \vec{S}_e . $G(\vec{r} - \vec{r}_i)$ es el potencial de intercambio.

El 3er término es la interacción dipolar que conduce a los términos dipolo-dipolo y de contacto. $\vec{\mu}_e$ y $\vec{\mu}_i$ son los momentos magnéticos de los electrones incidentes y magnéticos respectivamente.

Los 2 últimos términos son las interacciones spin-ór-

(7). (Physical Review - 1968 - Vol 176 - N° 2 - 176)

bita para el electrón magnético y el incidente respectivamente donde $\phi(\vec{r} - \vec{r}_i)$ es la interacción de Coulomb entre los electrones magnéticos y los electrones incidentes, m es la masa electrónica y \vec{P}_e es el momentum del electrón incidente.

El modelo que usamos es el siguiente: los electrones incidentes están representados por ondas planas y los electrones magnéticos por funciones hidrogenoides del tipo 3d correspondientes a los electrones no apareados; el scattering lo describimos por la aproximación de Born de 1er orden.

El cálculo detallado de la amplitud de scattering correspondiente a cada término del hamiltoniano se encuentra en los apéndices; el resultado final es:

$$f(\vec{K}, \psi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} e^{-W(\vec{K})} \sum_i e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}_i} \left\{ \frac{4\pi Z_N e^2}{r^2 + K^2} + G(\vec{K}) S_i^z S_e^z \right. \\ \left. + \frac{4\pi e^2}{m^2 c^2} \langle a_f | \vec{S}_i \cdot \vec{S}_e^\perp | a_i \rangle F(\vec{K}) + 2\pi i \beta^2 F(\vec{K}) \sin\psi S_i^z \frac{k_0^2}{\alpha^2 + K^2} \right. \\ \left. + 2\pi i \beta^2 Z_N D(\vec{K}) \sin\psi S_e^m \left(\frac{k_0}{K} \right)^2 \right\}$$

donde $F(\vec{K})$ es el factor de forma magnético que surge del hecho que los electrones están alejados del núcleo. $D(\vec{K})$ es el factor que contiene los efectos del apantallamiento del potencial atómico en la interacción spin-órbita. k_0 es el número de onda del electrón incidente, \vec{K} es el vector de onda transferido en el scattering y ψ es el ángulo de scattering. β es el magneton de Bohr $\frac{e\hbar}{mc}$. Z_N es la carga nuclear del átomo magnético.

\vec{S}_e y \vec{S}_i son los spines del electrón magnético e incidente respectivamente. Los supraíndices z , \perp y m en los spines corres-

penden a las componentes paralelas al eje magnético del cristal tomado en la dirección z , perpendicular a \vec{K} y perpendicular al plano de scattering, respectivamente. $G(\vec{K})$ es el potencial de intercambio.

α^{-1} es el radio medio orbital de los electrones magnéticos. Se define como $\alpha = \frac{Z}{a_0}$ donde Z es la carga efectiva del átomo del cristal y a_0 es el radio de Bohr. r^{-1} es el radio de apantallamiento de los átomos del cristal.

El factor $e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}_i}$ se debe al hecho de que se suman coherentemente las amplitudes de scattering para cada átomo de la red periódica, cuyo vector de red cristalina es \vec{R}_i .

El factor $e^{-W(\vec{K})}$, de Debye - Waller, contiene la dependencia con la temperatura. Si se aumenta la temperatura del cristal, la intensidad de los haces obtenidos por reflexión de Bragg disminuye pero el ancho angular del haz reflejado no se modifica.

El factor de Debye-Waller es el que da cuenta de este fenómeno y es del tipo $e^{-W(\vec{K})}$ siendo $W(\vec{K}) = \frac{1}{3} \langle u^2 \rangle K^2$

$\langle u^2 \rangle$ es el promedio estadístico de $u(t)$ donde $u(t)$ es la fluctuación dependiente del tiempo de la posición del átomo; este término es el que contiene la dependencia en la temperatura. Para analizar cuales son los términos de mayor contribución a la amplitud de scattering debemos tomar formas asintóticas.

En el trabajo de Vredevøe y De Wames se estudia el scattering de electrones que inciden sobre una superficie de un material ferromagnético. El problema que a nosotros nos interesa es el de scattering de los electrones de la capa 4s de los átomos del cristal con los de la capa 3d. Luego la energía de nuestros electrones incidentes es bastante menor que la



considerada por ellos.

Comparemos entonces el N° de onda correspondiente a una energía del orden de 5 e V para los electrones incidentes que corresponde a los de la capa $4s$, con α y Γ . Estos son del orden de la inversa del radio de Bohr, es decir del orden de 10^8 cm^{-1} o 10^7 si tenemos en cuenta que para α debemos dividir por Z que es la carga eficaz del átomo.

El k_0 correspondiente a una energía de 5 e V es del orden de 10^8 cm^{-1} . Luego nuestras magnitudes difieren de los límites tomados en el trabajo de Vredevoe y De Wames. Un límite apropiado para nuestro problema es tomar $k_0 > \alpha, \Gamma > K$, es decir considerar que la energía transferida en el scattering es bastante menor que la energía incidente.

Luego nuestro límite será:

$$k_0^2 \gg \alpha^2, \Gamma^2 \gg K^2$$

Los factores $G(\vec{K})$, $F(\vec{K})$ y $D(\vec{K})$ ⁽⁸⁾ toman entonces

la forma siguiente:

$$G(\vec{K}) \approx \frac{e^2}{k_0^2} \left[1 - \frac{K^2}{\alpha^2} \right] \quad \text{para} \quad k_0^2 \gg \alpha^2 \gg K^2$$

$$F(\vec{K}) = 1 \quad \text{para} \quad \alpha^2 \gg K^2$$

$$D(\vec{K}) \approx -\frac{K^2}{-2} \quad \text{para} \quad \Gamma^2 \gg K^2$$

(8) Este factor aparece en el término de efecto spin-órbita para el electrón incidente. Este término no ha sido calculado en detalle por ser análogo al término de spin-órbita para el electrón magnético

De los cinco términos de la amplitud de scattering el mayor es el de Coulomb. Es conveniente entonces normalizar los términos respecto al de interacción coulombiana para poder compararlos.

Tengamos además en cuenta que la energía del electrón en reposo es mucho mayor que la cinética dentro del sólido.

$$E_e = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \ll mc^2$$

Para la energía incidente considerada tenemos que

$$\frac{E_e}{mc^2} \approx 10^{-10}$$

ya que para un electrón $mc^2 \approx 5 \cdot 10^5$ eV

Consideremos que

$$\frac{K^2}{\alpha^2} \approx \frac{K^2}{\Gamma^2} \approx \frac{\alpha^2}{k_0^2} \approx \frac{\Gamma^2}{k_0^2} \approx 10^{-2}$$

Las 4 razones son las siguientes

$$\frac{f \text{ interc.}}{f \text{ coul.}} \approx \frac{\Gamma^2}{k_0^2} \left(1 - \frac{K^2}{\alpha^2}\right)$$

$$\frac{f \text{ dip}}{f \text{ coul.}} \approx \frac{\beta^2 \Gamma^2}{e^2} = \frac{\hbar^2 \Gamma^2 / m}{mc^2}$$

$$\frac{f \text{ s.o. elect. mag.}}{f \text{ coul.}} \approx \frac{\beta^2}{e^2} \left(\frac{k_0}{\alpha}\right)^2 \Gamma^2 = \frac{\hbar^2 \Gamma^2 / m}{mc^2} \left(\frac{k_0}{\alpha}\right)^2$$

$$\frac{f \text{ s.o. elect. inci.}}{f \text{ coul.}} \approx \frac{\beta^2}{e^2} \left(\frac{k_0}{\Gamma}\right)^2 \Gamma^2 = \frac{\hbar^2 \Gamma^2 / m}{mc^2} \left(\frac{k_0}{\Gamma}\right)^2$$

Vemos que el término de interacción de intercambio es el mayor de los cuatro y que el término de interacción dipolar es despreciable frente al resto. Por lo tanto en nuestro problema la mayor contribución a la amplitud de scattering vendrá dada por la interacción coulombiana seguida de la de intercambio y finalmente de la de spin-órbita.

Vemos además que por la dependencia de K con Ψ al

aumentar el ángulo de scattering disminuyen todos los términos de la amplitud de scattering.

Los términos con dependencia lineal en el spin de los electrones dispersados, contribuyen en un término también lineal a la sección eficaz (módulo cuadrado de la amplitud de scattering). Este término lineal es responsable de la polarización (9).

Por ejemplo si consideramos una amplitud de scattering de la forma

$$f = a + \sum_{\alpha} b_{\alpha} \sigma_{\alpha}$$

donde σ_{α} es la matriz de Pauli para la componente α del spin, la polarización estará dada por $\langle \sigma_{\alpha} \rangle = 2 \left[\frac{\text{Re}(a^* b_{\alpha})}{|a|^2 + \sum_{\alpha} |b_{\alpha}|^2} \right]$

Volviendo a nuestro problema de scattering entre electrones del cristal, habrá entonces una interferencia en la sección eficaz de scattering entre los términos de interacción de Coulomb y de intercambio, éste último con dependencia lineal en el spin.

Sin embargo no habrá interferencia entre los términos de interacción de Coulomb y de spin órbita porque en 1era aproximación de Born la amplitud correspondiente al término de Coulomb es real y las otras son imaginarias, luego la interacción spin órbita no contribuye a la polarización.

La expresión para la polarización será:

$$\langle \sigma_e^z \rangle = \frac{16 \pi Z_N e^2 G(\vec{K}) (K^2 + \Gamma^2)}{64 \pi^2 Z_N^2 e^4 + [G(\vec{K}) S_{ie}^z]^2 (K^2 + \Gamma^2)^2}$$

y considerando nuestros límites obtenemos

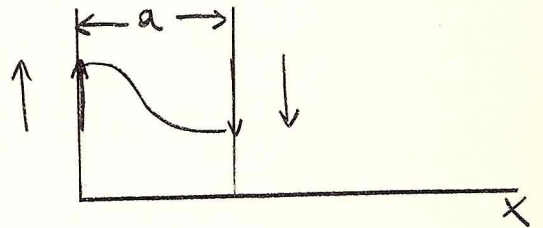
$$\langle \sigma_e^z \rangle \approx \frac{Z_N (1 - \frac{K^2}{\alpha^2}) \Gamma^2 k_0^2}{Z_N^2 k_0^4 + (1 - \frac{K^2}{\alpha^2})^2 \Gamma^4}$$

(9) Wu and Ohmura, Quantum Theory of Scattering (Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 1962).

Vemos entonces que la polarización disminuye al aumentar la energía incidente y que está dirigida según el eje de magnetización Z del material.

Al considerar el scattering entre electrones del material, debemos tomar en cuenta que los electrones incidentes estarán parcialmente polarizados por el hecho de tener una magnetización dentro del material. Además al considerar el scattering a través de la pared de Bloch tendremos una magnetización variable en dirección y la variación puede expresarse de la siguiente manera si designamos por a el ancho de la pared y por z la dirección inicial de la magnetización

$$M_z = M \tanh \frac{13,5x}{a}$$



Para analizar cual será la polarización del haz dispersado debemos considerar la suma de las distintas colisiones que se producen a lo largo de la pared. Suponemos que cada electrón sufre un solo choque dentro de la pared, pero la polarización de cada uno de ellos dependerá del plano, dentro de la pared, en el cual se produce la colisión. Habrá que tomar un promedio sobre todos los planos ya que la distribución de choques dentro de la pared no tiene por qué ser uniforme.

Consideramos que un electrón es dispersado si, por ejemplo, pasa la pared manteniendo su spin paralelo al eje magnético inicial, y no es dispersado si, una vez atravesada la pared, su spin es paralelo al eje magnético final, ya que este estado corresponde al estado inicial y no cambia su energía.

Luego los electrones que atraviesan la pared sin cam-

biar su dirección de spin son los que contribuirán a la resistividad del material, ya que sus estados finales son distintos de los iniciales debido a la diferencia entre la dirección de sus spines y el eje de magnetización del cristal antes y después de atravesar la pared. Recordemos que la resistividad estaba relacionada con el desorden existente en la red cristalina. Por lo tanto, lo que interesa es comparar la distribución de equilibrio del dominio con la distribución que sale inmediatamente después de la pared.

Habrá que plantear, entonces, una ecuación de Boltzmann con polarización local variable de la magnetización y la función de distribución dependerá de esta última además de la coordenada X .

Lo que interesa destacar es la polarización producida por la interacción de los términos coulombiano y de intercambio en el proceso de scattering de los electrones del cristal y el hecho de que la pared de Bloch contribuye a este scattering.

Apéndice I.

Interacción de Coulomb: Consideremos un potencial apantallado del tipo

$$V(\vec{r} - \vec{R}_i) = \frac{Z_N e^2}{|\vec{r} - \vec{R}_i|} e^{-\Gamma |\vec{r} - \vec{R}_i|}$$

donde \vec{r} es la posición del electrón incidente, \vec{R}_i la posición del átomo, Z_N la carga nuclear del átomo y Γ el radio de apantallamiento del potencial atómico.

La amplitud de scattering correspondiente a este término en la aproximación de Born es

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_i \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

donde \vec{k} y \vec{k}' son los vectores de onda del electrón incidente, antes y después del scattering. Definamos \vec{K} de la siguiente manera

$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$$

Reemplazando obtenemos:

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_i \int e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} \frac{Z_N e^2}{|\vec{r} - \vec{R}_i|} e^{-\Gamma |\vec{r} - \vec{R}_i|} d\vec{r}$$

Hacemos el cambio de variable

$$\vec{r} - \vec{R}_i = \vec{R} \quad d\vec{r} = d\vec{R}$$

$$f = -\frac{m Z_N e^2}{2\pi\hbar^2} \sum_i e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_i} \int e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}} \frac{e^{-\Gamma R}}{R} d\vec{R}$$

$$f = -\frac{m Z_N e^2}{2\pi\hbar^2} \sum_i e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_i} \int e^{-iKR \cos\theta} \frac{e^{-\Gamma R}}{R} R^2 dR d(\cos\theta)$$

tomo \vec{K} en la dirección \hat{Z} ; θ es el ángulo entre \vec{R} y \vec{K}

$$f = -\frac{m Z_N e^2}{2\pi\hbar^2} \sum_i e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}_i} 2\pi \int_0^\infty e^{-\tau R} R dR \int_{-1}^1 e^{-iKR\cos\theta} d(\cos\theta)$$

$$f = -\frac{m Z_N e^2}{2\pi\hbar^2} \sum_i e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}_i} \frac{4\pi}{\tau^2 + K^2}$$

Apéndice 2 .

Interacción de intercambio.

$$H = \sum_i G(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{S}_e \cdot \vec{S}_i$$

\vec{r} y \vec{S}_e son la posición y el spin del electrón incidente y análogamente

\vec{r}_i y \vec{S}_i para el electrón magnético

La amplitud de scattering en la aproximación de Born es

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle f | H | i \rangle$$

$|i\rangle$ y $|f\rangle$ son los estados iniciales y finales que se pueden expresar

de la siguiente manera

$$|i\rangle = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \psi_{3d}(\vec{r}_i) |a_i\rangle$$

$$|f\rangle = e^{i\vec{K}'\cdot\vec{r}} \psi_{3d}(\vec{r}_i) |a_f\rangle$$

$|a_i\rangle$ y $|a_f\rangle$ contienen las coordenadas de spin de los 2 electrones

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_i \langle a_f | \int e^{-i\vec{K}'\cdot\vec{r}_i} \psi_{3d}^*(\vec{r}) \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} \psi_{3d}(\vec{r}_i) e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \cdot$$

$$\vec{S}_e \cdot \vec{S}_i d\vec{r} d\vec{r}_i |a_i\rangle$$

$$f = -\frac{m_e e^2}{2\pi\hbar^2} \sum_i \langle af | \vec{S}_e \cdot \vec{S}_i | ai \rangle \iint e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \psi_{3d}(\vec{r}) \psi_{3d}(\vec{r}_i) \cdot \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} d\vec{r} d\vec{r}_i$$

Calculemos el término $\langle af | \vec{S}_e \cdot \vec{S}_i | ai \rangle$

Consideramos $|ai\rangle$ y $|af\rangle$ como el producto de las coordenadas de spin de cada electrón y los operadores \vec{S}_e y \vec{S}_i se aplican sobre sus correspondientes coordenadas. Como el eje magnético del cristal está en la dirección Z, trabajamos con autoestados de S_z .

Si suponemos que hay conservación de spin total y que además el estado final es igual al inicial, sobrevive un sólo término

$$\langle S_e^z S_i^z | \vec{S}_e \cdot \vec{S}_i | S_e^z S_i^z \rangle = \frac{1}{2} \langle S_e^z S_i^z | S_e^+ S_i^- + S_e^- S_i^+ + 2 S_e^z S_i^z | S_e^z S_i^z \rangle = S_e^z S_i^z$$

La función de onda hidrogenoide es

$$\psi_{nlm} = \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} N_{nl} F_{nl}\left(\frac{2Zr}{na}\right) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad \text{con}$$

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \quad \text{y}$$

$$F_{nl}(x) = x^l e^{-1/2x} L_{n-l-1}^{2l+1}(x)$$

en nuestro caso $n=3$ $l=2$ y $\frac{Z}{a} = \alpha$

$$\psi_{32m}(\vec{r}_i) = \alpha^{3/2} \frac{2}{3^2(5!)^{3/2}} \left(\frac{2}{3}\pi_i\alpha\right)^2 e^{-\frac{\pi_i\alpha}{3}} 5! Y_2^m(\theta_i, \varphi_i)$$

reemplazando obtenemos

$$f = -\frac{m_e e^2 \alpha^7 2^6}{2\pi\hbar^2 3^8 5!} \sum_i S_e^z S_i^z \iint e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-\frac{\pi_i\alpha}{3}} e^{-\frac{\pi\alpha}{3}} \cdot \frac{\pi_i^2 \pi^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} Y_2^{*m}(\theta, \varphi) Y_2^m(\theta_i, \varphi_i) d\vec{r} d\vec{r}_i$$

Sabemos que

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \frac{1}{R} d\vec{R} = \frac{4\pi}{k^2}$$

luego la antitransformada

será

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \frac{4\pi}{k^2} d\vec{k}$$

reemplazando y separando las 3 integrales

$$f = -\frac{m e^2 \alpha^7 2^6 4\pi}{2\pi k^2 385! (2\pi)^{3/2}} \sum_i S_e^z S_i^z \int \frac{dk_{||}}{k_{||}} \int d\vec{r} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}'')\cdot\vec{r}} \\ \cdot e^{-\frac{\pi\alpha}{3} r^2} Y_2^{*m}(\theta\varphi) \int d\vec{r}_i e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}'')\cdot\vec{r}_i} e^{-\frac{\pi\alpha}{3} r_i^2} Y_2^m(\theta_i\varphi_i)$$

las 2 integrales en r y r_i son iguales, luego calculemos una

$$\int d\vec{r}_i e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}'')\cdot\vec{r}_i} r_i^2 e^{-\frac{\pi\alpha}{3} r_i^2} Y_2^m(\theta_i\varphi_i) = \\ = \int dr_i r_i^4 e^{-\frac{\alpha\pi r_i^2}{3}} \int_0^{2\pi} d\varphi_i \int_{-1}^1 d(\cos\theta_i) e^{-i|\vec{k}' - \vec{k}''| r_i \cos\theta_i} Y_2^m(\theta_i\varphi_i)$$

tomo $(\vec{k}' - \vec{k}'')$ en la dirección \hat{z}

La relación entre los $Y_l^m(\theta\varphi)$ y los $P_l^m(\cos\theta)$ es

$$Y_l^m(\theta\varphi) \propto P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

reemplazando en nuestra integral vemos que el único término que depende de φ es $e^{im\varphi}$ y éste integrado entre 0 y 2π da cero para todo valor de m excepto $m = 0$

Luego la única contribución a nuestra integral es $m = 0$. En

este caso tenemos que

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta) \quad \text{luego}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{1}{2} (3\cos^2\theta - 1)$$

reemplazando obtenemos la siguiente integral

$$\sqrt{\frac{5\pi}{4}} \int_0^\infty dr_i r_i^4 e^{-\frac{\alpha\pi r_i^2}{3}} \int_{-1}^1 d(\cos\theta_i) e^{-i|\vec{k}' - \vec{k}''| r_i \cos\theta_i} (3\cos^2\theta_i - 1)$$

llamemos $h = |\vec{k}' - \vec{k}''|$

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{5\pi}{4}} \int_0^\infty dr_i r_i^4 e^{\frac{\alpha r_i}{3}} \left[3 e^{-i h r_i \cos \theta_i} \left(\frac{\cos^2 \theta_i}{-i h r_i} + \frac{2 \cos \theta_i}{h^2 r_i^2} \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{2}{i h^3 r_i^3} \right) + \frac{e^{-i h r_i \cos \theta_i}}{i h r_i} \right]_{-1}^1 = \\ & = \sqrt{\frac{5\pi}{4}} \left[4 \int dr_i e^{-\frac{\alpha r_i}{3}} r_i^3 \frac{\sin h r_i}{h} + 12 \int dr_i e^{-\frac{\alpha r_i}{3}} r_i^2 \frac{\cos h r_i}{h^2} \right. \\ & \quad \left. - 12 \int dr_i e^{-\frac{\alpha r_i}{3}} r_i \frac{\sin h r_i}{h^3} \right] \end{aligned}$$

defino x por $x = \frac{\alpha}{3}$

$$\begin{aligned} & = \sqrt{\frac{5\pi}{4}} \left[-\frac{4}{h} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \left(\frac{h}{x^2+h^2} \right) + \frac{12}{h^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{x}{x^2+h^2} \right) - \frac{24}{h^3} \frac{x h}{(x^2+h^2)^2} \right] \\ & = \sqrt{\frac{5\pi}{4}} \left[\frac{-96x + 12 \cdot 8 \frac{x^3}{h^2}}{(x^2+h^2)^3} + \frac{4 \cdot 48 x^3}{(x^2+h^2)^4} - \frac{96 \frac{x}{h^2}}{(x^2+h^2)^2} \right] \end{aligned}$$

multiplico ambos términos de la última fracción por $(x^2 + h^2)^2$, saco x factor común y obtengo

$$= \sqrt{\frac{5\pi}{4}} 192 x \left(-\frac{1}{(x^2+h^2)^3} + \frac{x^2}{(x^2+h^2)^4} \right)$$

Luego la amplitud de scattering queda

$$\begin{aligned} f & = -\frac{m e^2}{2\pi \hbar^2} \frac{16384}{98415} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \alpha^9 \sum_i S_e^z S_i^z \left(\frac{dk_{||}}{k_{||}} \left(\frac{\alpha^2/q}{(\alpha^2/q + |k+k-k_{||}|^2)^4} \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \frac{1}{(\alpha^2/q + |k+k-k_{||}|^2)^3} \right) \left(\frac{\alpha^2/q}{(\alpha^2/q + |k-k_{||}|^2)^4} - \frac{1}{(\alpha^2/q + |k-k_{||}|^2)^3} \right) \right) \end{aligned}$$

$$f = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \sum_i G(\vec{K}) S_e^z S_i^z \quad \text{habiendo reemplazado} \quad |k-k_{||}| = |k+k-k_{||}|$$

Apéndice 3.Interacción dipolar .

$$H = \vec{\mu}_e \cdot \left\{ \vec{\nabla}_R \times \sum_i \left[\vec{\mu}_i \times \frac{(\vec{r} - \vec{r}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} \right] \right\}$$

La amplitud de scattering correspondiente a este término, por un tratamiento análogo al del apéndice 2, es

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle af | \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi_{3d}^*(\vec{r}_i) \vec{\mu}_e \cdot \left\{ \vec{\nabla}_R \times \sum_i \left[\vec{\mu}_i \times \frac{(\vec{r} - \vec{r}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} \right] \right\} \psi_{3d}(\vec{r}_i) d\vec{r} d\vec{r}_i | e_i \rangle$$

haciendo el cambio de variable

$$\vec{r} - \vec{r}_i = \vec{R} \quad d\vec{r} = d\vec{R}$$

se obtiene

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_i \langle af | \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \vec{\mu}_e \cdot \left\{ \vec{\nabla}_R \times \left[\vec{\mu}_i \times \frac{\vec{R}}{R^3} \right] \right\} d\vec{R} \cdot \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \psi_{3d}^*(\vec{r}_i) \psi_{3d}(\vec{r}_i) d\vec{r}_i | e_i \rangle$$

la última integral es el factor de forma $F(\vec{k})$ que surge del hecho que los electrones magnéticos están alejados del núcleo.

Calculemos $F(\vec{k})$ reemplazando las funciones ψ_{3d} por lo obtenido en el apéndice 2.

$$F(\vec{k}) = \frac{2^6 \alpha^7}{3^8 5!} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} r^4 e^{-\frac{2r\alpha}{3}} Y_2^{*m}(\theta\varphi) Y_2^m(\theta\varphi) d\vec{r}$$

Desarrollando e $-i \vec{K} \cdot \vec{r}$ en función de polinomios de Legendre y tomando \vec{K} en la dirección Z y llamando A la constante que aparece fuera de la integral obtenemos

$$F(\vec{R}) = A \sum_{l=0}^{\infty} \int (2l+1) (-i)^l j_l(kr) r^6 e^{-2\frac{r\alpha}{3}} dr \int P_l(\cos\theta) Y_2^{*m} Y_2^m d\Omega$$

usando las relaciones entre esféricos armónicos y funciones de Legendre obtenemos

$$F(\vec{R}) = A \sum_{l=0}^{\infty} \int (2l+1) (-i)^l j_l(kr) r^6 e^{-2\frac{r\alpha}{3}} dr \cdot \frac{5(2-m)!}{4\pi(2+m)!} \int P_l^0 P_2^m P_2^m d\Omega$$

usando la fórmula para la integral del producto de 3 funciones de Legendre obtenemos que m debe ser 0 y que $0 \leq l \leq 4$, es decir que $l = 0, 2, 4$

$$F(\vec{R}) = A \frac{5}{4\pi} \int \left[\frac{2}{5} j_0(kr) r^6 e^{-2\frac{r\alpha}{3}} - \frac{4}{7} j_2(kr) r^6 e^{-2\frac{r\alpha}{3}} + \frac{36}{35} j_4(kr) r^6 e^{-2\frac{r\alpha}{3}} \right] dr$$

Calculemos los $j_l(Kr)$

$$j_m = (-1)^m z^m \left(\frac{d}{z dz} \right)^m \frac{\sin z}{z}$$

$$j_0 = \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$j_2 = -\frac{\sin \rho}{\rho} - 3 \frac{\cos \rho}{\rho^2} + \frac{3 \sin \rho}{\rho^3}$$

$$j_4 = \frac{\sin \rho}{\rho} + \frac{10 \cos \rho}{\rho^2} - \frac{45 \sin \rho}{\rho^3} - \frac{105 \cos \rho}{\rho^4} + \frac{105 \sin \rho}{\rho^5}$$

$$F(\bar{r}) = \frac{2\alpha^7}{39\pi} \left[\int \frac{70}{35k} \operatorname{sen}(kr) \cdot r^5 e^{-\frac{2\alpha r}{3}} dr + \right.$$

$$\left. \int \frac{420}{35k^2} \cos(kr) r^4 e^{-\frac{2\alpha r}{3}} dr - \int \frac{1680}{35k^3} \operatorname{sen}(kr) r^3 e^{-\frac{2\alpha r}{3}} dr \right.$$

$$\left. - \int \frac{3780}{35k^4} \cos(kr) r^2 e^{-\frac{2\alpha r}{3}} dr + \int \frac{3780}{35k^5} \operatorname{sen}(kr) r e^{-\frac{2\alpha r}{3}} dr \right]$$

Calculamos las distintas integrales

$$\int r^5 e^{-xr} \operatorname{sen} kr dr = -\frac{\partial^5}{\partial x^5} \left(\frac{k}{x^2+k^2} \right) =$$

$$= \frac{720kx}{(x^2+k^2)^4} - \frac{3840kx^3}{(x^2+k^2)^5} + \frac{3840kx^5}{(x^2+k^2)^6}$$

$$\int r^4 e^{-xr} \cos kr dr = \frac{\partial^4}{\partial x^4} \left(\frac{x}{x^2+k^2} \right) =$$

$$= \frac{120x}{(x^2+k^2)^3} - \frac{480x^3}{(x^2+k^2)^4} + \frac{384x^5}{(x^2+k^2)^5}$$

$$\int \operatorname{sen} kr e^{-xr} r^3 dr = -\frac{\partial^3}{\partial x^3} \left(\frac{k}{x^2+k^2} \right) =$$

$$= -\frac{24kx}{(x^2+k^2)^3} + \frac{48kx^3}{(x^2+k^2)^4}$$

Reemplazando se obtiene

$$F(\bar{r}) = \frac{2}{\pi 39 35} \left(\frac{\alpha}{k} \right)^7 \left[\frac{50400 \frac{x}{k} - 282240 \frac{x^3}{k^3}}{\left(\left(\frac{x}{k} \right)^2 + 1 \right)^4} \right] + \left[\frac{-268800 \frac{x^3}{k^3} + 161280 \frac{x^5}{k^5}}{\left(\left(\frac{x}{k} \right)^2 + 1 \right)^5} \right]$$

$$+ \left[\frac{90720 \frac{x}{k} - 30240 \frac{x^3}{k^3}}{\left(\left(\frac{x}{k} \right)^2 + 1 \right)^3} \right] + \left[\frac{30240 \frac{x}{k}}{\left(\left(\frac{x}{k} \right)^2 + 1 \right)^2} \right] + \left[\frac{268800 \frac{x^5}{k^5}}{\left(\left(\frac{x}{k} \right)^2 + 1 \right)^6} \right]$$

Reduciendo todos los términos al mismo denominador queda

$$F(\vec{R}) = \frac{2}{\pi^{3/2}} \left(\frac{\alpha}{R}\right)^7 \left\{ \frac{544 \left(\frac{x}{R}\right) - 288 \left(\frac{x}{R}\right)^3 + 32 \left(\frac{x}{R}\right)^5}{\left(\left(\frac{x}{R}\right)^2 + 1\right)^6} \right\}$$

$$\text{donde } x = \frac{2\alpha}{3}$$

$$F(\vec{R}) = \frac{128}{\pi^{3/2}} \left(\frac{\alpha}{R}\right)^7 \left\{ \frac{17 \left(\frac{\alpha}{3R}\right) - 36 \left(\frac{\alpha}{3R}\right)^3 + 16 \left(\frac{\alpha}{3R}\right)^5}{\left(\frac{4}{9} \left(\frac{\alpha}{R}\right)^2 + 1\right)^6} \right\}$$

Calculemos ahora la otra parte de la integral

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_R \times \left[\vec{\mu}_i \times \frac{(\vec{R} - \vec{r}_i)}{|\vec{R} - \vec{r}_i|^3} \right] &= \vec{\nabla}_R \times \left[\vec{\mu}_i \times \vec{\nabla}_R \frac{1}{R} \right] = \\ &= -(\vec{\mu}_i \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} \frac{1}{R} + \vec{\mu}_i \nabla^2 \frac{1}{R} \end{aligned}$$

$$\text{pero } \nabla^2 \frac{1}{R} = -4\pi \delta(R) \quad \text{luego}$$

$$\vec{\mu}_e \cdot \left\{ \vec{\nabla}_R \times \left[\vec{\mu}_i \times \frac{\vec{R}}{R^3} \right] \right\} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{\nabla} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{R}) - 4\pi \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_i \delta(R)$$

Luego la 1era parte de la amplitud de scattering da

$$\begin{aligned} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \mu d\vec{R} &= - \int \vec{\mu}_e \cdot \vec{\nabla} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{R}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} d\vec{R} \\ &\quad - 4\pi \int \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \delta(R) d\vec{R} \end{aligned}$$

e integrando por partes se obtiene

$$\begin{aligned} &= i\vec{k} \cdot \vec{\mu}_e \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{R} d\vec{R} - 4\pi \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_i \\ &= (\vec{k} \cdot \vec{\mu}_e) (\vec{k} \cdot \vec{\mu}_i) \int \frac{1}{R} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} d\vec{R} - 4\pi \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_i \\ &= \frac{4\pi (\vec{k} \cdot \vec{\mu}_e) (\vec{k} \cdot \vec{\mu}_i)}{k^2} - 4\pi \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_i \end{aligned}$$

$$\vec{\mu}_e = -\frac{e \vec{S}_e}{m c}$$

$$\vec{\mu}_i = -\frac{e \vec{S}_i}{m c} \quad \text{luego}$$

$$f = -\frac{4\pi e^2}{m^2 c^2} \sum_i \frac{m}{2\pi \hbar^2} \langle a_f | \left\{ \vec{S}_e \cdot \vec{S}_i - \frac{(\vec{S}_e \cdot \vec{K})(\vec{S}_i \cdot \vec{K})}{K^2} \right\} | a_i \rangle F(\vec{K})$$

$$f = -\frac{4\pi e^2}{m^2 c^2} \sum_i \frac{m}{2\pi \hbar^2} \langle a_f | \vec{S}_i [\hat{K} \times (\vec{S}_e \times \hat{K})] | a_i \rangle F(\vec{K})$$

$\hat{K} \times (\vec{S}_e \times \hat{K})$ da el vector \vec{S}_e en la dirección perpendicular a \hat{K} y en el plano formado por \vec{S}_e y \vec{K} , lo escribiremos \vec{S}_e^\perp

$$f = -\frac{4\pi e^2}{m^2 c^2} \sum_i \frac{m}{2\pi \hbar^2} \langle a_f | \vec{S}_i \cdot \vec{S}_e^\perp | a_i \rangle F(\vec{K})$$

Apéndice 4.

Interacción spin-órbita para el electrón magnético . -

$$H = \sum_i \left[\vec{\mu}_i \times \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \phi(\vec{r} - \vec{r}_i) \right] \cdot \vec{p}_e$$

La amplitud de scattering correspondiente a este término en 1era aproximación de Born, de acuerdo con el desarrollo del apéndice 2, es:

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_i \iint e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi_{3d}^*(\vec{r}_i) \left[\vec{\mu}_i \times \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \phi(\vec{r} - \vec{r}_i) \right] \cdot \vec{p}_e \psi_{3d}(\vec{r}_i) d\vec{r} d\vec{r}_i$$

haciendo el cambio de variable

$$\vec{r} - \vec{r}_i = \vec{R} \quad d\vec{r} = d\vec{R} \quad \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} = -\vec{\nabla}_R$$

$$f = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_i \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \left[\vec{\mu}_i \times \vec{\nabla}_R \frac{\phi(R)}{2emc} \right] \cdot \vec{p}_e d\vec{R} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \psi_{3d}^*(\vec{r}_i) \psi_{3d}(\vec{r}_i) d\vec{r}_i$$

la última integral es el factor de forma $F(\vec{k})$ calculado en el apéndice 3. Resolvamos entonces la integral en R . El potencial $\phi(R)$ es de la forma

$$\phi(\vec{R}) = \frac{e^2 e^{-\alpha R}}{R} \quad \vec{\mu}_i = -\frac{e\vec{S}_i}{mc}$$

$$A = -\frac{e^2}{2m^2 c^2} \left[\vec{S}_i \times \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \vec{\nabla}_R \frac{e^{-\alpha R}}{R} dR \right] \cdot \vec{p}_e$$

$$A = -\frac{e^2}{2m^2c^2} \left[\vec{S}_i \times \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \left(\frac{\alpha e^{-\alpha R}}{R} - \frac{e^{-\alpha R}}{R^2} \right) \hat{R} d\vec{R} \right] \cdot \vec{P}_e$$

Descompongo \hat{R} en las 3 direcciones x, y, z

$$\hat{R} = \cos\theta \hat{z} + \sin\theta \cos\varphi \hat{x} + \sin\theta \sin\varphi \hat{y}$$

Elijo \vec{k} en la dirección \hat{z} . Luego debo hacer las 3 integrales siguientes:

$$- \int e^{-iKR\cos\theta} \left(\frac{\alpha e^{-\alpha R}}{R} + \frac{e^{-\alpha R}}{R^2} \right) \cos\theta d\vec{R} \quad (\text{dirección } \hat{z})$$

$$- \int e^{-iKR\cos\theta} \left(\frac{\alpha e^{-\alpha R}}{R} + \frac{e^{-\alpha R}}{R^2} \right) \sin\theta \cos\varphi d\vec{R} \quad (\text{dirección } \hat{x})$$

$$- \int e^{-iKR\cos\theta} \left(\frac{\alpha e^{-\alpha R}}{R} + \frac{e^{-\alpha R}}{R^2} \right) \sin\theta \sin\varphi d\vec{R} \quad (\text{dirección } \hat{y})$$

Las 2 últimas integrales se anulan al integrar el $\sin\varphi$ y el $\cos\varphi$ en un período completo. Luego queda solamente la integral en la dirección \hat{z} que es la dirección de \vec{k} .

$$\begin{aligned} & - \int e^{-iKR\cos\theta} \left(\frac{\alpha e^{-\alpha R}}{R} + \frac{e^{-\alpha R}}{R^2} \right) \cos\theta d\varphi d(\cos\theta) R^2 dR = \\ & = -2\pi \int_{-1}^1 \cos\theta d\theta \left[\int_0^{\infty} \alpha R e^{(-\alpha - iK\cos\theta)R} dR + \int_0^{\infty} e^{(-\alpha - iK\cos\theta)R} dR \right] \\ & = \frac{4\pi i k}{\alpha^2 + k^2} \end{aligned}$$

Luego la integral que estábamos calculando queda

$$A = \frac{-e^2 4\pi i k}{2m^2c^2 (\alpha^2 + k^2)} \left[\vec{S}_i \times \vec{k} \right] \cdot \vec{P}_e$$

El momento del electrón scaterreado \vec{P}_e está en el plano de scattering, luego no tiene componente según la dirección perpendicular al plano de scattering que denominamos \hat{n} .

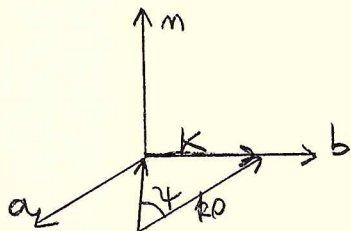
Llamamos \hat{a} y \hat{b} , a 2 vectores unitarios y perpendiculares entre si del plano de scattering. Todo vector puede entonces descomponerse según las direcciones \hat{a}, \hat{b} y \hat{n} .

Habíamos definido \vec{K} por

$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$$

Suponemos que el vector de onda del electron incidente varía en dirección pero no en módulo. Luego $|k| = |k'|$ y ψ es en ángulo entre \vec{k} y \vec{k}' . Entonces $K = 2 k_0 \sin \frac{\psi}{2}$ siendo \vec{k}_0 el vector de onda incidente.

Tomamos \vec{K} en la dirección de uno de los ejes



Luego

$$(\vec{S}_i \times \vec{K}) \cdot \vec{k}_0 = K S_i^m k_0 \cos \frac{\psi}{2}$$

y usando la relación de K en función de k_0 y ψ obtenemos

$$A = \frac{-e^2}{m^2 c^2} i \frac{2\pi k^2 k_0^2}{(\alpha^2 + K^2)} \sin \psi$$

Luego la amplitud de scattering queda

$$f = \frac{-m}{2\pi k^2} \sum_i 2\pi i \beta^2 F(\vec{K}) \sin \psi S_m^m \frac{k_0^2}{\alpha^2 + K^2}$$

donde β es el magneton de Bohr $\frac{e\hbar}{mc}$