ISSN 0029-3865

CBPF-NF-021/90

ORDEM MAGNÉTICA ESPONTÂNEA DERIVADA DE UM MODELO DUBLETO-SINGLETO LOCALIZADO-ITINERANTE[†]

por

P.J. von RANKE*, L. PALERMO[+] and X.A. da SILVA[1]

[1]Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF/CNPq
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150
22290 - Rio de Janeiro, RJ - Brasil

*Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)
Rua São Francisco Xavier, 524
20550 - Rio de Janeiro, RJ - Brasil

[+]Universidade Federal Fluminense (UFF)
Outeiro de São João Batista s/n
24020 - Niterói, RJ - Brasil

[†]Aceito para apresentação na 42ª Reunião Anual da SBPC (1990); também para publicação na revista da SBPC.

RESUMO

Considera-se um sistema de ions de terras-raras e de elétrons de condução. Os elétrons 4f das terras-raras sofrem a ação de um campo cristalino e também interagem com os elétrons de condução. Estudamos a partir de um modelo simples a condição de aparecimento de ordem magnética espontânea para o caso em que o estado fundamental do ion de terra-rara apresenta degenerescência.

Palavras-chave: Magnetismo; Campo cristalino; Ordem magnética espontânea.

INTRODUÇÃO

Em trabalho recente[1], estudou-se o comportamento magnético de um sistema contendo ions de terras-raras e elétrons de condução, levando em conta que os elétrons 4f da terra-rara estão sob a ação de um campo cristalino e também interagem com os elétrons de condução a partir de um modelo simples. No modelo adotou-se um campo cristalino com simetria axial e supôs-se $J=1$ (J sendo o momento angular total dos elétrons 4f da terra-rara); a interação com o campo cristalino da origem a um desdobramento singleto - dubleto (com separação D) do nível $(2J+1)$ degenerado dos elétrons 4f. O estudo do comportamento magnético a $T=0$ K foi realizado ao longo da direção de fácil magnetização (na direção perpendicular à direção axial de simetria do campo cristalino). Nesse trabalho, que segue basicamente a notação e formulação da ref. 1, consideramos que a interação devida ao campo cristalino provoca um desdobramento dubleto-singleto, i.e., o estado fundamental é degenerado Essa circunstância dá origem a uma indeterminação na condição limiar de ordem magnética espontânea. O propósito desse trabalho é discutir a natureza dessa singularidade através de um algorĩtmo que permita redefinir adequadamente o momento magnético associado ao nível fundamental (degenerado na ausência de campo magnético). Na seção 2 apresenta-se o hamiltoniano modelo e na seção 3, obtém-se os auto-valores e os momentos magnéticos em função dos parâmetros do modelo e finalmente na seção 4 é feita uma análise da condição de ordem espontânea a $T=0$ K.

2 HAMILTONIANO MODELO E GRANDEZAS MAGNÉTICAS

Na aproximação de campo molecular, temos

$$H = \bar{H}_e + \bar{H}_{ion} \tag{1}$$

$$\bar{H}_e = H_e - 2\mu_b \vec{h}_e \sum_i \vec{s}_i \tag{2.a}$$

$$\bar{H}_{ion} = H_{ion} - g\mu_b \vec{h}_{ion} \sum_i \vec{J}_i \tag{2.b}$$

onde H_e descreve a dinâmica dos elétrons de condução; a H_e está associado uma densidade de estado $\eta(\varepsilon)$ que desempenha papel importante na determinação do momento magnético eletrônico. H_{ion} é dado por

$$H_{ion} = - D \sum_i (J_i^z)^2 \tag{3}$$

$$2\mu_b \vec{h}_e = 2\mu_b \vec{h}_o + J_o(g-1) \ \langle\vec{J}\rangle \tag{4.a}$$

$$g\mu_b \vec{h}_i = g\mu_b \vec{h}_o + J_o(g-1) \ \langle\vec{s}\rangle \tag{4.b}$$

onde h_o é o campo magnético externo, J_o é o parâmetro de troca e g é o fator de Landé. A partir das equações (2.a) e (2.b) e das relações (4.a) e (4.b), queremos obter as magnetizações eletrônicas e iônicas a T=0 K. Para uma densidade de estado $\eta(\varepsilon)$ retangular a partir de (1.a), obtém-se[1]

$$2\mu_b \vec{h}_e = 8\varepsilon_o \gamma \ \langle\vec{s}\rangle \tag{4.c}$$

onde $2\varepsilon_o\gamma$ é o nível de Fermi. Na determinação da magnetização iônica, convêm escrever (2.b) sob forma de matriz

$$\bar{H}_{ion} = \begin{bmatrix} -D-\alpha\cos\theta & \frac{\alpha\text{sen}\theta}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\alpha\text{sen}\theta}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\alpha\text{sen}\theta}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\alpha\text{sen}\theta}{\sqrt{2}} & -D+\alpha\cos\theta \end{bmatrix} \qquad (5)$$

onde $\alpha = g\mu_b h_i$ e θ é o ângulo formado entre o campo magnético efetivo h_i e o eixo z de simetrial axial do cristal. A representação matricial de H_{ion} foi construída na base dos auto-vetores de J_z.

3 AUTO-VALORES E MOMENTOS MAGNÉTICOS EM FUNÇÃO DOS PARÂMETOS DO MODELO

Do Hamiltoniano (5) determinamos a equação característica que relaciona os auto-valores λ com os parâmetros do modelo

$$\lambda^3 + 2D\lambda^2 + (D^2-\alpha^2)\lambda + \alpha^2 D\text{sen}^2\theta = 0 \qquad (6)$$

de (6) podemos derivar os momentos magnéticos induzidos na direção do campo magnético efetivo

$$m_i = -\frac{d\lambda_i}{dh_i} = g\mu_b \langle i|J_{z'}|i\rangle, \text{ onde z' está na direção de } \vec{h}_i. \qquad (7)$$

onde λ_i são as raízes da eq. (6). Combinando (6) e (7) obtém-se

$$\langle i|J_{z'}|i\rangle = \frac{2(D\text{sen}^2\theta - \lambda_i)\alpha}{3\lambda_i^2 + 4D\lambda_i + D^2-\lambda^2} \qquad (8)$$

A relação (8) combinada com a relação (6) fornece os momentos magnéticos dos níveis de energia λ_i, $i = 0,1,2$.

4 CONDIÇÃO DE ORDEM ESPONTÂNEA A T=0 K

A condição de ordem espontânea é obtida da seguinte maneira: toma-se o limite de α tendendo a zero, i.e., lineariza-se a relação (8) em α. Em seguida substitui-se a energia λ_o do estado fundamental não degenerada. Finalmente levamos em conta a dependência de α, relações (4.b), (4.c) e (4.a), com o momento magnético $<0|J_{z'}|0>$ do estado fundamental. Este procedimento entretanto torna-se problemático para o estudo em questão, pois para o estado fundamental degenerado (dubleto) a equação característica (6) apresenta raiz dupla $\lambda_o = -D$. Consequentemente temos uma indeterminação na relação (8) no estudo da condição de ordem. Para contornar este problema adota-se o seguinte procedimento: expande-se a energia do estado fundamental até segunda ordem em α

$$E = -D + (\lim_{\alpha\to 0} \frac{d\lambda}{d\alpha})\alpha + \frac{1}{2}(\lim_{\alpha\to 0} \frac{d^2\lambda}{d\alpha^2})\alpha^2 \qquad (9)$$

onde as derivadas no limite $d\lambda/d\alpha$ e $d^2\lambda/d\alpha^2$ são obtidas a partir da equação característica. Derivando duas vezes a equação característica,

$$[3\lambda^2+4D\lambda+D^2-\alpha^2]\frac{d^2\lambda}{d\alpha^2} + [6\lambda+4D](\frac{d\lambda}{d\alpha})^2 + 4\alpha\frac{d\lambda}{d\alpha} - 2(\lambda+D\operatorname{sen}\theta) = 0 \qquad (10)$$

obtém-se:

$$\lim_{\alpha\to 0} \frac{d\lambda}{d\alpha} = \pm \cos\theta \tag{11}$$

Derivando (10) mais uma vez e tendo em conta (11), temos

$$\lim_{\alpha\to 0} \frac{d^2\lambda}{d\alpha^2} = -\frac{\mathrm{sen}^2\theta}{D} \tag{12}$$

para $\theta \neq \pi/2$. Substituindo (11) e (12) em (9), pode-se calcular o momento magnético do estado fundamental

$$\bar{m}_o = \frac{\mathrm{sen}^2\theta}{D}\,\alpha \tag{13}$$

onde

$$\bar{m}_o = -\frac{\partial E}{\partial \alpha} - \cos\theta \tag{14}$$

com o auxílio das relações (4.b), (4.c) e (4.a) e h_o=0, obtém-se a condição de ordem:

$$\left(\frac{J_o}{\varepsilon_o}\right)^2 (g-1)\,\frac{2\mathrm{sen}^2\theta}{8\gamma(D/\varepsilon_o)} = \eta \tag{15}$$

para $\eta > 1$ o sistema apresenta ordem espontânea (fase ferromagnética). Para $\eta < 1$ o sistema apresenta-se na fase paramagnética. Para $\theta = \pi/2$ a equação característica pode ser fatorada, dando a seguinte condição de ordem espontânea

$$\left(\frac{J_o}{\varepsilon_o}\right)^2 \frac{(g-1)^2}{4\gamma(D/\varepsilon_o)} = \eta \tag{16}$$

CONCLUSÃO

A condição de ordem magnética espontânea permite um estudo paramétrico. da magnetização nas fases ferromagnética e paramagnética. Neste trabalho podemos destacar três fatos relevantes. Em primeiro a necessidade da elaboração de um algoritmo para tratar o problema de ordem espontânea de um sistema que apresenta um estado fundamental degenerado. Em segundo a redefinição do momento magnético na relação (14) para manter a consistência física e em terceiro podemos notar a descontinuidade na condição de ordem magnética espontânea em $T=0$ K para $\theta=\pi/2$. O papel do campo cristalino e da interação de troca nos intermetálicos de terra-raras em geral é amplamente discutido na literatura, por ex., na referência 2.

REFERÊNCIAS

1. L. Iannarella, X.A. da Silva and A.P. Guimarães. A simple model for Localized-Itinerant Magnetic System: Crystal Field Effects. Journal of Mag. and Mag. Mat. 81, 313-317 (1989).

2. W.E. Wallace and E. Segal, in: Rare Earth Intermetallics (Academic Press, New York and London, 1973).