

TRANSIÇÕES METAMAGNÉTICAS EM SISTEMAS ELETRÔNICOS ITINERANTES

Leonardo Otávio Schilipake², Ben Hur Bernhard³

¹ Vinculado ao projeto “Descrição Teórica de materiais magnéticos”

² Acadêmico (a) do Curso de Licenciatura em Física – CCT – Bolsista PROBIC/UDESC

³ Orientador(a), Departamento de Física – CCT – benhur.bernhard@udesc.br.

⁴ Acadêmico(a) do Curso de Licenciatura em Física – CCT.

Na teoria de Landau, aplicada a um sistema ferromagnético, a energia livre de Helmholtz pode ser expressa na forma de uma expansão na magnetização M :

$$F = F_0 + F_2 M^2 + F_4 M^4 + F_6 M^6 + \dots$$

Considerando os termos até a quarta ordem, é possível descrever uma transição de fase contínua ou de segunda ordem:

$$F = a(T - T_0)M^2 + bM^4$$

Como sabemos da Termodinâmica, o campo magnético externo H é dado por:

$$H = \frac{\partial F}{\partial M} = 2a(T - T_0)M + 4bM^3$$

As transições metamagnéticas são caracterizadas, genericamente, por um aumento abrupto da magnetização decorrente de um aumento gradual do campo magnético externo. As transições de fase metamagnéticas em sistemas eletrônicos itinerantes são descritas pela teoria de Wohlfarth-Rhodes-Shimizu, baseada em uma expansão de Landau até termos de sexta ordem na magnetização. Nesse caso, o campo magnético é expresso como:

$$H = aM + bM^3 + cM^5$$

As transições metamagnéticas de primeira ordem podem ocorrer quando os coeficientes da expansão acima satisfazem a condição:

$$\frac{3}{16} \geq \frac{ac}{b^2} \geq \frac{9}{20}$$

De maneira alternativa, podemos descrever o magnetismo itinerante no âmbito da teoria de Stoner. Do ponto de vista microscópico, a teoria de Stoner pode ser derivada a partir do modelo de Hubbard, dentro de uma aproximação de campo médio. A condição de instabilidade para o aparecimento de uma magnetização espontânea pode ser obtida a partir de uma análise energética. Os números médios de elétrons up e $down$ são:

$$n_{\uparrow} = \frac{1}{2}(n + g(E_F) \cdot \delta E)$$

$$n_{\downarrow} = \frac{1}{2}(n - g(E_F) \cdot \delta E)$$

A variação da energia cinética dos elétrons de condução é: $\Delta E_K = \frac{1}{2}g(E_F) \cdot (\delta E)^2$

A variação da energia magnética é: $\Delta E_M = -\frac{1}{2}\mu_0\lambda\mu_B^2(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2$

A energia total do sistema é $\Delta E = \Delta E_K + \Delta E_M$

Quando $\Delta E > 0$, a energia total do sistema é mínima para $M=0$, logo não há magnetização. No caso de $\Delta E < 0$, a energia total do sistema é mínima para $M \neq 0$, logo haverá magnetização. Com isso podemos determinar o critério de Stoner para o ferromagnetismo itinerante:

$$Ug(E_F) > 1$$

O hamiltoniano efetivo na teoria de Stoner é dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \sum_{i\sigma} h_\sigma^{\text{eff}} n_{i\sigma}$$

onde o primeiro termo do lado direito corresponde à aproximação do modelo *tight-binding*, e o segundo termo envolve o campo efetivo $h^{\text{eff}}=h-Um$, que depende da magnetização local m . As densidades de estados de spin up e down sofrem um deslocamento relativo de banda rígida, e o valor de m deve ser calculado de maneira autoconsistente.

A fig. 1 mostra as densidades de estados *tight-binding* para uma rede retangular para diferentes valores da razão entre os hoppings t_y/t_x . A fig. 2 mostra as curvas de magnetização calculadas para diferentes valores do parâmetro U . A reentrância das curvas assinala a presença da transição metamagnética.

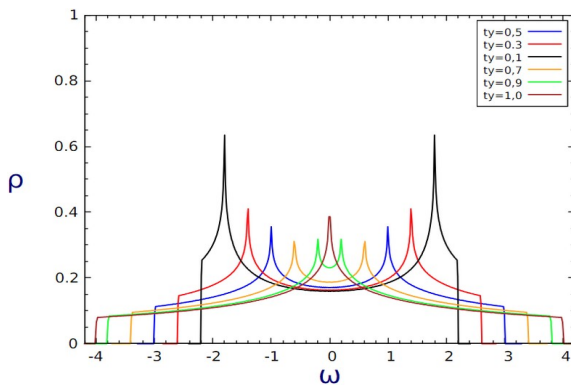


Figura 1. Densidade de Estados.

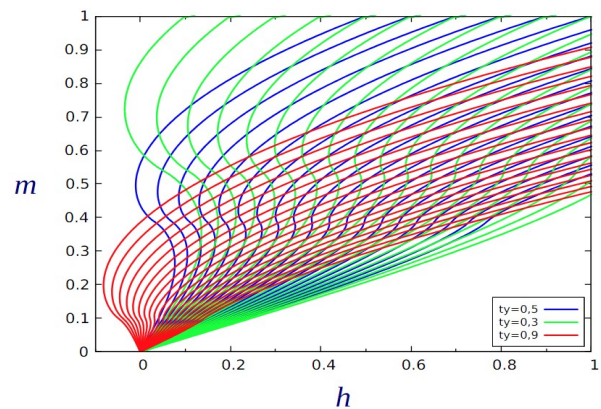


Figura 2. Curvas de Magnetização.

Referências:

- [1] J. Steinbach, *Transições de fase metamagnéticas em materiais magnetocalóricos itinerantes*, Dissertação de Mestrado, Universidade do Estado de Santa Catarina (2016).
- [2] B.H. Bernhard, J. Steinbach, *Magnetocaloric effect in itinerant magnets around a metamagnetic transition*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 441, 49 (2017).
- [3] M. Shimizu. *Itinerant electron metamagnetism*, Journal de Physique 43, 155 (1982).
- [4] H. Yamada, *Metamagnetic transition and susceptibility maximum in an itinerant-electron system*, Phys. Rev. B 47, 11211 (1993).

Palavras-chave: Metamagnetismo. Magnetismo Itinerante. Transições Metamagnéticas.