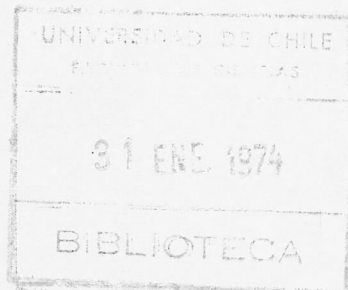


UCH-FC
LIC-F
L11724
C1

EFECTOS DE LA SUPERZONA EN LA ESTRUCTURA
MAGNETICA DEL METAL EUROPIO

ROBERTO LACOS
DEPARTAMENTO DE FISICA
FACULTAD DE CIENCIAS
UNIVERSIDAD DE CHILE



A mis padres,

a Mirella

y

a mi compañera María Eugenia

una gran mujer.

El presente trabajo se presenta para cumplir con los requisitos para optar al título de Licenciado en Física.

Desco agradecer al Dr. Miguel Kiwi y al Dr. Jaime Rüsseler por sus inapreciables consejos y ayuda durante el semestre de investigación y además por la amistad que me han brindado durante los últimos años de mi carrera.

SANTIAGO, Enero de 1974.

I N D I C E

	Página
I.- INTRODUCCION	1
II.- HAMILTONIANO DEL PROBLEMA	2
III.- MODELO AUTOCONSISTENTE DE LA SUPERFICIE DE FERMI ...	9
IV.- i) APENDICE 1	15
ii) APENDICE 2	16
iii) FIGURA 1	17
iv) FIGURA 3	18
REFERENCIAS	19

I.- INTRODUCCION

Los estudios experimentales del metal Europio (Eu) a través de difracción de neutrones y mediciones de resistividad eléctrica (Ref. 4), indican que bajo la temperatura $T = T_N \approx 90^{\circ}\text{K}$ el metal exhibe una fase antiferromagnética en espiral. La estructura cristalina del metal es cúbica de cuerpo centrado y se observa (Ref. 4) que el período de tal espiral es $3.5\bar{a}$ (siendo \bar{a} la constante de la red) muy cerca de $T = T_N$ y que además para $T \approx 0.05 T_N$ el período es $3.6\bar{a}$, lo que indica que el estado antiferromagnético del metal depende muy débilmente de T cuando $T \leq T_N$.

La idea básica del presente trabajo es obtener un modelo simple y autoconsistente de la superficie de Fermi del Eu, que dé cuenta del estado antiferromagnético, es decir, que incluya la superestructura magnética superpuesta a la estructura cristalina del metal, introduciendo un número de parámetros adicionales y que éstos sean accesibles experimentalmente.

Ahora, en base a las referencias citadas (Ref. 4, Ref. 5, Ref. 6) la sección II presenta la descripción del Hamiltoniano del problema basada en la interacción R.K.K.Y., (Ruderman, Kittel, Kasuya y Yosida), entre espines localizados, teoría bastante aceptable para describir la estructura magnética de las tierras raras pesadas.

En la sección III se describe el origen de nuestro modelo para la superficie de Fermi del Europio y se parte de los intentos que se han hecho (Ref. 4, Ref. 5, Ref. 6) y que describen el estado antiferromagnético parcialmente o simplemente no lo describen. De todos modos ellos indican el posible camino a seguir para conseguir nuestra meta.

Actualmente está en proceso un programa de computación para comparar los resultados de este nuevo modelo, con los datos experimentales, existentes u otros que son accesibles, también experimentalmente.

II. HAMILTONIANO DEL PROBLEMA

La estructura atómica del Eu es $[X_0] 4f^7 6s^2$, considerando sus propiedades ópticas (Ref. 4) se concluye que los electrones 4f tienen energías fuera del rango de la banda de conducción y siendo los electrones 6s² de conducción ya tenemos el punto de partida para una aproximación.

Los electrones $6s^2$ interactúan con los electrones $4f$ y con el campo cristalino del metal. Asumimos que esta interacción no perturba el esquema de electrones libres para los $6s^2$, lo que se consigue igualando a una la parte periódica de la función de Bloch respectiva y mejoramos nuestra aproximación buscando la más exacta expresión posible para las bandas de energía (omitimos el índice de banda ya que suponemos en juego una sola banda).

Como es sabido (Ref. 1 y Ref. 2) el hecho que varias partículas sean idénticas y que la función de onda que las describe sea antisimétrica, aún cuando no interactúan dinámicamente, introduce una correlación entre ellas. La energía de intercambio surge de la interacción coulombiana y de la correlación antes mencionada (no hay análogo clásico). En nuestro caso este intercambio es s-f. Debido a que los electrones $4f$ están localizados y su rango de energía está fuera de la banda de conducción (efectos de hibridización s-f despreciables), podemos considerar al spin de los electrones $4f$ (o del ión E_u^{+2}) no como operadores sino como simples vectores (aproximación semi-elástica).

Entonces el Hamiltoniano de los electrones de conducción y su correlación con los electrones $4f$ (o ión E_u^{+2}) es (ver Ref. 1, 2 y 6)

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{(i)} \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - 2 \sum_{\alpha, j} J_{\alpha j} \vec{S}_\alpha \cdot \vec{S}_j \delta(\vec{r}_j - \vec{R}_\alpha) \quad (2-1)$$

El primer término es la energía cinética de los electrones de conducción, el segundo considera la energía de intercambio donde:

- \vec{S}_α : spin del ión E_u^{+2} localizado en \vec{R}_α ($|\vec{S}_\alpha| = \text{constante}$)
- \vec{S}_j : spin del electrón j en la posición \vec{r}_j
- $J_{\alpha j}$: integral de intercambio y proviene de la superposición de la distribución de carga del electrón j y el ión α (Ref. 1).

Además, podemos suponer $J_{\alpha j} = J = \text{constante}$, medible experimentalmente (Ref. 6) entonces (2-1) queda

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{(i)} h_{0i} + \sum_{(j)} h_j \quad (2-2)$$

$$h_j = \frac{\vec{p}_j^2}{2m} \quad (2-3)$$

$$h'_{ij} = -2J \sum_{\alpha} \vec{S}_{i\alpha} \cdot \vec{S}_{j\alpha} \delta(\vec{k}_j - \vec{k}_i) \quad (2-4)$$

Al considerar el cuadro de electrones libres tenemos que la función de onda de los electrones de conducción es :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \chi_s \quad (2-5)$$

V : volumen del cristal

χ_s : parte spinorial de la función de onda

$\vec{k} = (\vec{k}, s)$, s spin del electrón con momento igual a $\frac{\hbar}{\hbar} \vec{k}$

de (2-3) (2-4) y (2-5) tenemos

$$\langle \vec{k} | h_0 | \vec{k}' \rangle = \epsilon_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (2-6)$$

($\epsilon_{\vec{k}}$ no depende del spin)

$$\langle \vec{k} | h'_{ij} | \vec{k}' \rangle = -\frac{J}{V} \sum_{\alpha, s, s'} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_{\alpha}}$$

$$\cdot \left(S_+^{\alpha} \chi_s S_- \chi_{s'} + S_-^{\alpha} \chi_s S_+ \chi_{s'} + 2S_z^{\alpha} \chi_s S_z \chi_{s'} \right) \quad (2-7)$$

ahora como $\chi_s = \uparrow$ ó \downarrow tenemos las siguientes propiedades para los operadores de subida y bajada

$$\begin{array}{lll} S_- \uparrow = \downarrow & S_+ \uparrow = 0 & 2S_z \uparrow = \uparrow \\ S_- \downarrow = 0 & S_+ \downarrow = \uparrow & 2S_z \downarrow = -\downarrow \end{array} \quad (2-8)$$

considerando (2-6) (2-7) y (2-8) (por ejemplo S_+ destruye un electrón \downarrow y crea un electrón \uparrow), pasamos a segunda cuantización :

$$H_0' = \sum_{k, k'} \langle k | H_j' | k' \rangle C_k^+ C_{k'}$$

C_k^+ : crea un electrón con energía E_k

C_k : destruye un electrón con energía E_k

y redefiniendo $J = J/V$, tenemos

$$H_0' = -J \sum_{\substack{\alpha \\ k, k'}} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}_\alpha} \left(S_+^\alpha C_{k\downarrow}^+ C_{k'\uparrow} + S_-^\alpha C_{k\uparrow}^+ C_{k'\downarrow} + S_z^\alpha (C_{k\uparrow}^+ C_{k'\uparrow} - C_{k\downarrow}^+ C_{k'\downarrow}) \right) \quad (2-9)$$

Considerando J pequeño para hacer teoría de perturbaciones y haciendo una transformación canónica de H (Apéndice 2),

obtenemos:

$$\tilde{H}_0 = H_{00} + H_0'' \quad (2-10)$$

$$H_0'' = \frac{1}{2} [H_0', S] \quad (2-11)$$

$$S = -J \sum_{\rho, q, q'} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{R}_\rho} \left(S_+^\rho C_{q\downarrow}^+ C_{q'\uparrow} + S_-^\rho C_{q\uparrow}^+ C_{q'\downarrow} + S_z^\rho (C_{q\uparrow}^+ C_{q'\uparrow} - C_{q\downarrow}^+ C_{q'\downarrow}) \right) \quad (2-12)$$

Calculamos H_0'' usando (2-9), (2-11), (2-12) y teniendo presente que

$$\{C_\xi, C_{\xi'}\} = \{C_\xi^+, C_{\xi'}^+\} = 0, \quad \{C_\xi^+, C_{\xi'}\} = \delta_{\xi\xi'}$$

$$[C_\xi^+ C_{\xi'}, C_{\eta'}^+ C_{\eta'}] = C_\xi^+ C_{\eta'} \delta_{\xi'\eta'} - C_{\eta'}^+ C_\xi \delta_{\xi\eta'} \quad (2-13)$$

$$\delta_{\xi\xi'} = \delta_{\vec{\xi}\vec{\xi}'} \delta_{\xi\xi'} \quad (\xi = (\vec{\xi}, \xi))$$

y que \vec{S}_α lo consideramos vector (no operador), obtenemos luego de un cálculo tedioso (simplemente algebraico)

$$H'' = \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ q', k, k'}} \int^2 e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}_\alpha} \cdot e^{-i(\vec{q}-\vec{q}') \cdot \vec{R}_\beta} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_{q'} - \epsilon_{k'}} + \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k'}} \right) \cdot \left(C_{k\downarrow}^+ C_{q'\downarrow} U_1(\alpha, \beta) + C_{k\uparrow}^+ C_{q'\downarrow} U_2(\alpha, \beta) + C_{k\downarrow}^+ C_{q'\uparrow} U_3(\alpha, \beta) + C_{k\uparrow}^+ C_{q'\uparrow} U_4(\alpha, \beta) \right) \quad (2-14)$$

con

$$\begin{aligned} U_1(\alpha, \beta) &= S_+^\alpha S_-^\beta + S_-^\alpha S_+^\beta \\ U_2(\alpha, \beta) &= S_-^\alpha S_+^\beta + S_+^\alpha S_-^\beta \\ U_3(\alpha, \beta) &= S_+^\alpha S_+^\beta - S_+^\alpha S_-^\beta \\ U_4(\alpha, \beta) &= S_+^\alpha S_-^\beta - S_-^\alpha S_+^\beta \end{aligned} \quad (2-15)$$

Como habíamos dicho anteriormente el estado antiferromagnético depende débilmente de la temperatura bajo $T = T_N$, consideramos el caso $T = 0$ por simplicidad.

La función de onda de los electrones de conducción es:

$$|\phi\rangle = \left| \frac{1}{k=0\uparrow}, \frac{1}{k=0\downarrow}, \dots, \frac{1}{k\uparrow}, \frac{1}{k\downarrow}, \dots, \frac{1}{k_F\uparrow}, \frac{1}{k_F\downarrow}, 0, 0, \dots \right\rangle \quad (2-16)$$

con $|\vec{k}| < |\vec{k}_F|$ k_F : k de Fermi

$$\mu = \epsilon_{k_F} \quad : \text{energía de Fermi}$$

Considerando que la alineación de los iones E_N^{+2} se debe a un potencial promedio de los electrones de conducción, que los supondremos no afectados por la interacción de intercambio (2-4); promediamos (2-14) sobre (2-16) y obtenemos :

$$H_{\text{RKKY}} = -J^2 \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \frac{2f_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{q}+\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}}} \vec{S}_{\vec{q}} \cdot \vec{S}_{-\vec{q}} \quad (2-17)$$

donde $f_{\vec{k}} = \begin{cases} 1 & \text{si } \epsilon_{\vec{k}} < \mu \\ 0 & \text{si } \epsilon_{\vec{k}} > \mu \end{cases}$, (2-18)

es la distribución de Fermi-Dirac a $T = 0$

y

$$\vec{S}_{\vec{q}} = \sum_{\alpha} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_{\alpha}} \vec{S}_{\alpha} \quad (2-19)$$

(definiendo $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$)

Vemos claramente que los únicos procesos permitidos en (2-14) son $\vec{q}' = \vec{k}$, $|\vec{k}'| < k_F$ ó $\epsilon_{\vec{k}} < \mu$ y además que quedan bloqueados los procesos de scattering con cambio de spin, (términos con U_3 y U_4 en (2-14)). Haciendo un cambio de índices $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$, $\vec{k} - \vec{q} \rightarrow \vec{k}'$ en (2-17) y sumando tenemos:

$$H_{\text{RKKY}} = -J^2 \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}} \vec{S}_{\vec{q}} \cdot \vec{S}_{-\vec{q}} \quad (2-20)$$

y recordando (2-18)

$$H_{\text{RKKY}} = -J^2 \sum_{\vec{q}} \chi(\vec{q}) \vec{S}_{\vec{q}} \cdot \vec{S}_{-\vec{q}} \quad (2-21)$$

"Interacción ión-ión vía electrones de conducción".
con

(2-28)

$$\sum_{\bar{q}} \bar{S}_{\bar{q}}^2 = M^2$$

(2-27)

$$J_{RKKY} = -J^2 \chi(\bar{q}) \sum_{\bar{q}} \bar{S}_{\bar{q}} \cdot \bar{S}_{-\bar{q}}$$

se logra con

Escogemos entonces q de tal manera que no satisfaga (2-24), esto

(2-26)

$$\chi = \chi(\bar{q}) \quad \sum_{\bar{q}} \bar{S}_{\bar{q}} \neq 0 \quad \bar{q} \neq \bar{q}'$$

La solución de (2-25) es

válida para cada q.

(2-25)

$$0 = \sum_{\bar{q}} \bar{S}_{\bar{q}} (\chi(\bar{q}) - \lambda) = 0$$

La parte real e imaginaria de $S_{\bar{q}}$ obtenemos de (2-24) como variable independiente (equivalente a considerar como independientes a

Introduciendo multiplicadores de Lagrange y considerando $S_{\bar{q}}$ y $S_{-\bar{q}}$

(2-24)

$$\sum_{\bar{q}} \chi(\bar{q}) |S_{\bar{q}}|^2 = \text{Máximo} \quad \sum_{\bar{q}} |S_{\bar{q}}|^2 = M^2 = \text{Constante}$$

Entonces el problema se reduce a buscar

(2-23)

$$\sum_{\bar{q}} \bar{S}_{\bar{q}} \cdot \bar{S}_{-\bar{q}} + \bar{q} = M^2 = \text{constante}$$

(2-19) en

construido a $|S_{\bar{q}}|^2 = \text{constante}$. Esta última condición se traduce a través de

Ahora buscamos el estado (antiferromagnético) que minimice (2-20),

"Susceptibilidad generalizada" (Ref. 1)

(2-22)

$$\chi(\bar{q}) = \frac{\sum_{\bar{k}} f_{\bar{k}} (1 - f_{\bar{k}+\bar{q}})}{f_{\bar{k}} - f_{\bar{k}+\bar{q}}}$$

$$y \quad \chi(\vec{Q}) \quad \Rightarrow \text{Máximo} \quad \left[\chi(\vec{q}) \right] \quad (2-29)$$

Resumiendo, hemos minimizado H_{KKK} optimizando la posición relativa de los spines localizados; expresando el Hamiltoniano en términos de sus autoestados.

Como el estado antiferromagnético es estable necesitamos que el máximo de $\chi(\vec{q})$ sea local, es decir;

$$\frac{\partial \chi}{\partial \vec{q}} \Big|_{\vec{q}=\vec{Q}} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial^2 \chi}{\partial \vec{q}^2} \Big|_{\vec{q}=\vec{Q}} < 0 \quad (2-30)$$

A partir de (2-19) y (2-28), y escogiendo la dirección de simetría como $(0,0,1)$, tenemos

$$\begin{aligned} S_x^\alpha &= M_1 \cos \vec{Q} \cdot \vec{R}_\alpha \\ S_y^\alpha &= M_1 \sin \vec{Q} \cdot \vec{R}_\alpha \\ S_z^\alpha &= M_2 \cos (\vec{Q} \cdot \vec{R}_\alpha + \phi) \\ \vec{Q} &= Q \hat{z}^* \end{aligned} \quad (2-31)$$

con M_1 , M_2 y ϕ relacionados entre sí por (2-28).

(2-31) indica una estructura magnética en espiral cuyo período está dado por \vec{Q} . Recordando los datos expuestos en la introducción tenemos que $|\vec{Q}| \approx 2\pi/2.5\bar{a}$ para $T = T_N$ y notamos que $\vec{Q} = \vec{0}$ no puede caracterizar un estado antiferromagnético, en este caso $\vec{S}_\alpha = \text{constante}$ para todo α , "Estado ferromagnético".

III.- MODELO AUTOCONSISTENTE DE LA SUPERFICIE DE FERMI

Por la forma de (2-22)

$$\chi(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}}(1 - f_{\vec{k}+\vec{q}})}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}} \tag{3-1}$$

venos que la topología de la superficie de Fermi (S.F.) y la estructura de bandas ($\epsilon_{\vec{k}}$) es la que determina la forma de (3-1).

Nuestro objetivo es entonces, encontrar un modelo de la S.F. que nos arroje una función $\chi(\vec{q})$ que posea un máximo en $\vec{q} = \vec{Q}$, siendo \vec{Q} el período de la estructura antiferromagnética (Ver (2-31))

De partida desechamos la estructura de bandas para electrones libres (S.F esférica), (Ver apéndice I).

De acuerdo a Andersen & Loucks (A & L) (Ref. 4) que calcularon la estructura de bandas del Eu, usando el método A.P.W. relativista y luego en base a ella la estructura de la S.F., obtuvieron finalmente que la superficie de Fermi consiste en dos piezas: una superficie de electrones (superhuevo) y una superficie de agujeros (tetracubo), siendo el diámetro del superhuevo cercano a 2Q (Ver (2-31)) y el diámetro del tetracubo cercano a Q (Ver Fig. 1)

La estructura del superhuevo queda bastante bien descrita por la expresión analítica (Ref. 4)

$$x^n + y^n + z^n = \text{constante} \tag{3-2}$$

$$n = 2, 3, 4, \dots$$

y tenemos los 2 casos límites: n = 2 (esfera) y n = ∞ (cubo).

El tetracubo es un superhuevo con 4 elipsoides dispuestos tetrahédricamente en 4 de sus vértices.

Siguiendo también las ideas de A & L podemos decir que: 2 porciones aproximadamente paralelas de la S.F. separadas por una distancia q^1 ("nesting" en \vec{q}^0) darán un máximo a (3-1) en $\vec{q} = \vec{q}^0$ ($q^1 = \vec{Q}$ nos daría la estructura antiferromagnética (2-31)).

Esto se puede esquematizar fácilmente en la figura 2.

(que son pocos aceptables dentro de un modelo físico)

después de remover las divergencias que provienen de los vértices y aristas

$\chi(q) \approx \frac{1}{4} \ln |q - \alpha| \quad (3-3)$

límite de R y para potencias bastante positivas de la S.F. (R-200, en Fig. 2)

Y encontraron que esta contribución del "nesting" no daba máximo para un radio

contribuyen con ningún "nesting" reduciéndose fundamentalmente a un superhuevo

= 0 (Fig. 2). Se pueden despreciar los 4 alípticos de éste debido a que no

en el cual reemplazaron las superficies por casquetes esféricos de radio $R \gg q$

trabajo y su contribución a la susceptibilidad. Usaron un modelo del tetraedro

Kiwi & Greene (K & G) (Ref. 5) investigaron el "nesting" del te-

demostraron que no hay "nesting" en Q entre el superhuevo y el tetraedro).

A & L se da de estabilizar la dependencia en la temperatura de Q (además a & L

en es el tetraedro (diámetro Q) y el único efecto posible del superhuevo según

mentalmente la única S.F. que contribuye en el estado antiferromagnético del

Resumiendo ya que el máximo de $\chi(q)$ está dado por $q = q_0$ funde-

bastante alejados del modelo de electrones libres para la S.F.

Notamos que de acuerdo con los resultados de A & L estamos ya

(máximo) es el "nesting" con $q^2 = 0$ ($0 \approx 2\pi/35Q$).

Luego relacionando (3-1) y (2-31) la mayor contribución de $\chi(q)$

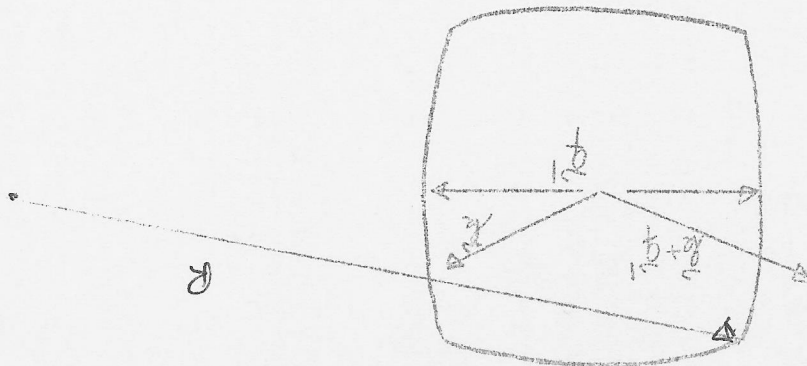
contribución a (3-1)

de la S.F. y tendremos $\frac{E_{k+q}}{E_k} - E_k$ muy pequeños; estos términos dan una gran

constante = μ) tendremos $\frac{E_k}{E_k} = 1$, $\frac{E_k + q^2}{E_k} = 0$ y $k + q^2$ muy cerca también

Si escogemos k cerca del borde de la S.F. (superficie de energía

Fig. 2



Por lo tanto no es suficiente considerar la interacción R.K.K.Y y el modelo de tetracubo (ahora superhuevo sin los elipsoides). K & G también confirmaron que la divergencia no desaparece considerando más términos en el desarrollo por teoría de perturbaciones.

En la búsqueda de un modelo apropiado no se ha considerado que al enfriar el metal bajo la temperatura T_j aparece un nuevo orden, distinto al orden cristalino (ordenamiento en espiral de los pines iónicos) y que los electrones de conducción "ven" esta nueva estructura (superestructura magnética: S.E.M.), que también es periódica (2-31) e incommensurable con la estructura cristalina (E.C.).

El primero en notar esto fue Elliot & Wedgwood (E & W) (Ref. 6) al estudiar un problema termodinámico en las tierras raras.

De acuerdo con (Ref. 3) una E.C. posee en el espacio recíproco una estructura periódica asociada, llamada zona de Brillouin (Z.B.). Argumentando como (Ref. 3) en las fronteras de la Z.B., se producen brechas de energías prohibidas (gaps) en la estructura de bandas, modificando la S.F.

Ahora, haciendo una analogía con la S.E.M., tenemos también algo parecido a la Z.B. asociada a la S.E.M. que llamamos superzona de Brillouin (S.Z.B.) y también en sus fronteras aparecerán gaps de energía, lo que nos modificará la estructura de la S.F. (trabajaremos en la zona S.Z.B.)

Si llamamos a $\epsilon_{\vec{k}}$ la estructura de bandas sin introducir los gaps, la nueva estructura de bandas será por analogía con la E.C. (Ref. 3) y (Ref. 6):

$$2 \epsilon_{\vec{k}}^1 = \epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} \pm \sqrt{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}})^2 + 4\Delta^2} \quad (3-4)$$

donde \vec{q} es el diámetro de la S.Z.B., contenida varias veces dentro de la Z.B. causada por el campo cristalino.

Hay evidencia experimental de la existencia de estas brechas a través de mediciones de resistividad eléctrica (Ref. 6).

Nuestro modelo es entonces una S.F. con forma de superhuevo, modificada por la inclusión autoconsistente de los gaps derivados de los efectos de la S.Z.B.

Tenemos por lo tanto la estructura del superhuevo de acuerdo a (3-2)

$$\frac{\epsilon_{\vec{k}}}{\mu} = \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu m_x^*} \right)^m + \left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu m_z^*} \right)^m \quad (3-5)$$

siendo $\mu = E_F$, $k_n^2 = k_x^2 + k_y^2$

m_x^* y m_z^* las masas respectivas (de los agujeros) en las direcciones x y z respectivamente. Por simplicidad y en un primer intento normalizamos (3-5) según $\mu = \hbar^2 = 2m_x^* = 2m_z^* = 1$ y escogiendo como en (2-31) la dirección z como dirección del eje de espiral podemos colocar $q = 2l(0,0,1)$, entonces:

$$2\epsilon_{\vec{k}}^l = 2k_n^{2m} + (l+x)^{2m} + (l-x)^{2m} \pm \sqrt{4\Delta^2 + ((l+x)^{2m} - (l-x)^{2m})^2} \quad (3-6)$$

con $x = |k_z - l|$ (3-7)

y $\epsilon_{\vec{k}+2\vec{l}}^l - \epsilon_{\vec{k}}^l = \sqrt{4\Delta^2 + ((l+x)^{2m} - (l-x)^{2m})^2}$ (3-8)

Definiendo

$$2\xi(x) = (l+x)^{2m} + (l-x)^{2m}$$

$$2\eta(x) = (l+x)^{2m} - (l-x)^{2m} \quad (3-9)$$

tendremos $\epsilon_{\vec{k}+2\vec{l}}^l - \epsilon_{\vec{k}}^l = 2\sqrt{\Delta^2 + \eta^2(x)}$ (3-10)

$$k_n^2 = \left(1 - \xi(x) \pm \sqrt{\Delta^2 + \eta^2(x)} \right)^{1/m} \quad (3-11)$$

Reemplazando en (3-1) la suma por una integral, e introduciendo coordenadas cilíndricas tenemos que:

$$\chi(q) = \int dx \Gamma_{\pm}(x) \quad (3-12)$$

donde $q = 2l$

$$y \quad \Gamma_{\pm}(x) = \frac{\pi}{2} \frac{\left(1 - \xi(x) \pm \sqrt{\Delta^2 + \eta^2(x)}\right)^{1/m}}{\sqrt{\Delta^2 + \eta^2(x)}}$$

(3-15)

Como se ve en la Fig. 3 los límites de integración dependen de la relación entre ℓ y Δ ya que corresponden a las raíces de $k_{\pm}^2 = 0$ o en forma equivalente a las raíces de

$$f(x) = \eta^2(x) - \xi^2(x) + 2\xi(x) + \Delta^2 - 1 \quad ; \quad (3-14)$$

ecuación trascendente de cuyo estudio a través de una calculadora hemos encontrado que sólo hay cuatro raíces reales $\pm x_1$ y $\pm x_2$, en el rango de interés. Dada la elección particular de coordenadas (3-7) nos interesa sólo el valor absoluto de las raíces. Tenemos entonces sólo dos valores interesantes $0 < x_1 < x_2$ (las raíces positivas ordenadas).

Volviendo a la figura 3 tenemos finalmente

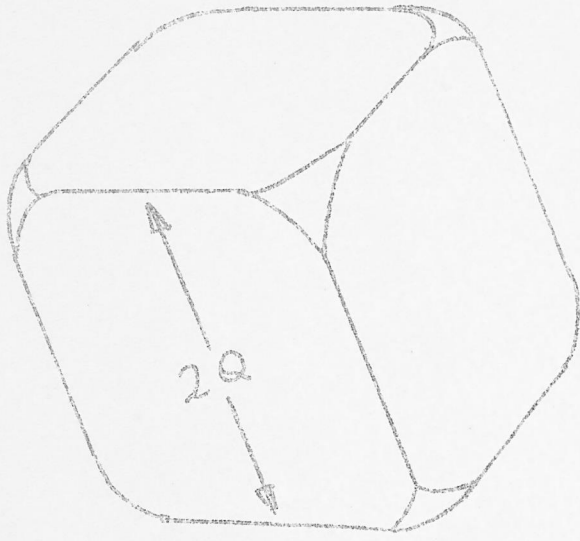
$$A) \quad \chi(\ell) = \int_0^{x_2} dx \Gamma_+(x) - \int_0^{x_1} dx \Gamma_-(x) \quad ; \quad \ell^{2/m} \leq 1 - \Delta \quad (3-15)$$

$$B) \quad \chi(\ell) = \int_0^{x_2} dx \Gamma_+(x) \quad ; \quad 1 - \Delta \leq \ell^{2/m} \leq 1 + \Delta \quad (3-16)$$

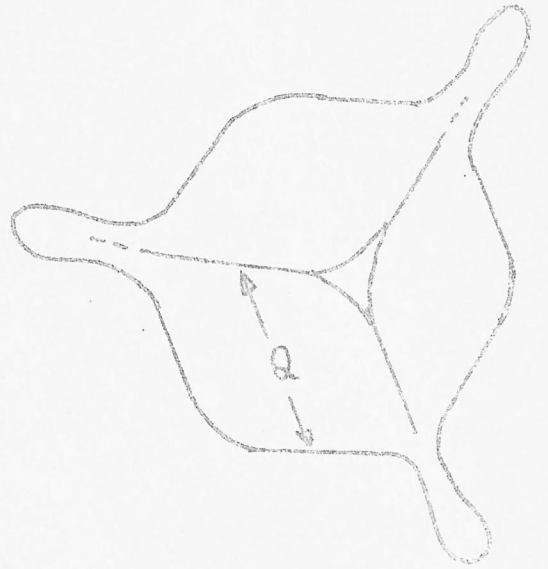
$$C) \quad \chi(\ell) = \int_{x_1}^{x_2} dx \Gamma_+(x) \quad ; \quad \ell^{2/m} \geq 1 + \Delta \quad (3-17)$$

(al pasar al límite $n = 2$ y $\Delta \rightarrow 0$ obtenemos (A-1-3))

Actualmente está en proceso un programa de computación para resolver (3-15-16-17), del cual esperamos ver confirmado este modelo.



B) TETRAEDRO



111) Fig. 1

11) APENDICE B

Tenemos $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}'$ $\lambda < 1$ (A-2-1)

Hacemos una transformación canónica

$$\tilde{\mathcal{H}} = e^{-S} \mathcal{H} e^S, \quad S^\dagger = -S \quad (\text{A-2-2})$$

entonces

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{[\mathcal{A}_k, S]}{k!} \quad (\text{A-2-3})$$

con $A_1 = \mathcal{H}$, $A_{k+1} = [\mathcal{A}_k, S]$, $k=1, 2, \dots, \infty$ (A-2-4)

Supongamos ya diagonalizado \mathcal{H}_0 es decir

$$\langle k | \mathcal{H}_0 | k' \rangle = \epsilon_k \delta_{kk'}; \quad \sum_{(k)} |k\rangle \langle k| = \mathbb{1} \quad (\text{A-2-5})$$

Queremos que bajo la transformación (A-2-2)

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \lambda^2 \mathcal{H}'' + (\text{términos superiores}) \quad (\text{A-2-6})$$

esto se consigue imponiendo para S la siguiente condición a partir de (A-2-3)

$$\lambda \mathcal{H}' + [\mathcal{H}_0, S] = 0 \quad (\text{A-2-7})$$

que junto a (A-2-5) nos dá

$$\langle k | S | k' \rangle = \lambda \frac{\langle k | \mathcal{H}' | k' \rangle}{\epsilon_{k'} - \epsilon_k} \quad (\text{A-2-8})$$

finalmente tenemos que

$$\mathcal{H}'' = \frac{1}{2} [\mathcal{H}', S/\lambda] \quad (\text{A-2-9})$$

IV.- 1) APENDICE I

Susceptibilidad calculada en el modelo de electrones libres a

$T = 0^{\circ}K.$

La estructura de bandas es:

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad , \quad E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \tag{A-1-1}$$

y de acuerdo a (2-31) escogemos $\vec{q} = q(0,0,1)$

De (3-1) y (2-18) tenemos:

$$\chi(q) = -\frac{2m}{\hbar q} \int_V \frac{d^3 k}{(2k_z + q)} \tag{A-1-2}$$

donde V es la zona achurada de la figura A-1 (calculada según (A-1-1) y (2-18))

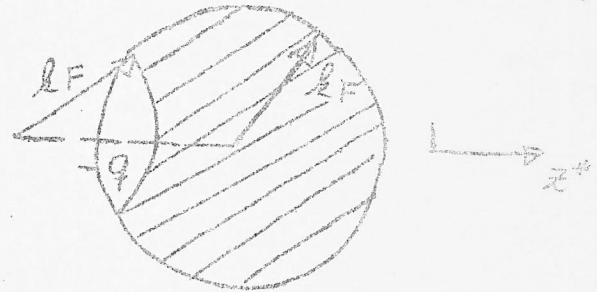


Fig. A-1

Evaluando esta integral (pasando a coordenadas cilíndricas) tenemos:

nos:

$$\chi(y) = \frac{\pi m k_F}{\hbar^2} f(y) \tag{A-1-3}$$

con

$$y = q/2k_F$$

y

$$f(y) = 1 + \frac{1-y^2}{2y} \ln \left| \frac{1+y}{1-y} \right| \tag{A-1-4}$$

($y=1$ se llama singularidad de Kohn.)

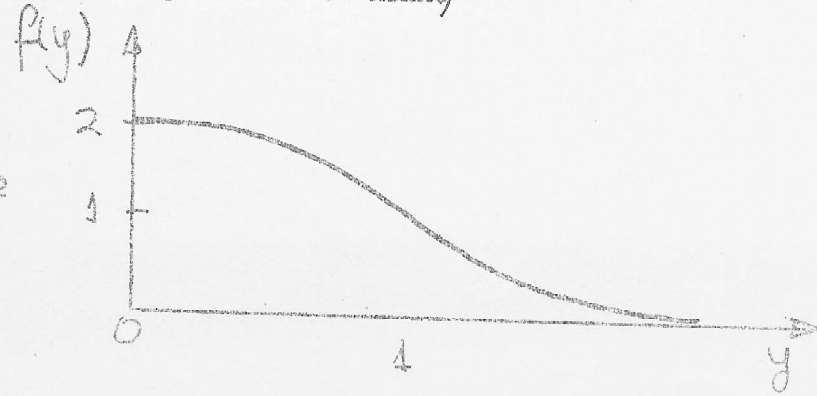


Fig. A-2

graficando para $\alpha = 0$ (Fig. 4) (que no destruye mucho la simetría esférica de (3-5) y que ya tiene porciones bastante paralelas.), podemos comprender cual es la importancia de la S.F.M. incluida autocconsistentemente.

No haremos mayores cálculos con la simplificación (3-18) ya que los resultados de la figura 4 son bastante alentadores.

El cálculo detallado con (3-5) se hará en la computadora Barrow de la Universidad Católica de Chile y sus resultados se incluirán como agregado a este trabajo.

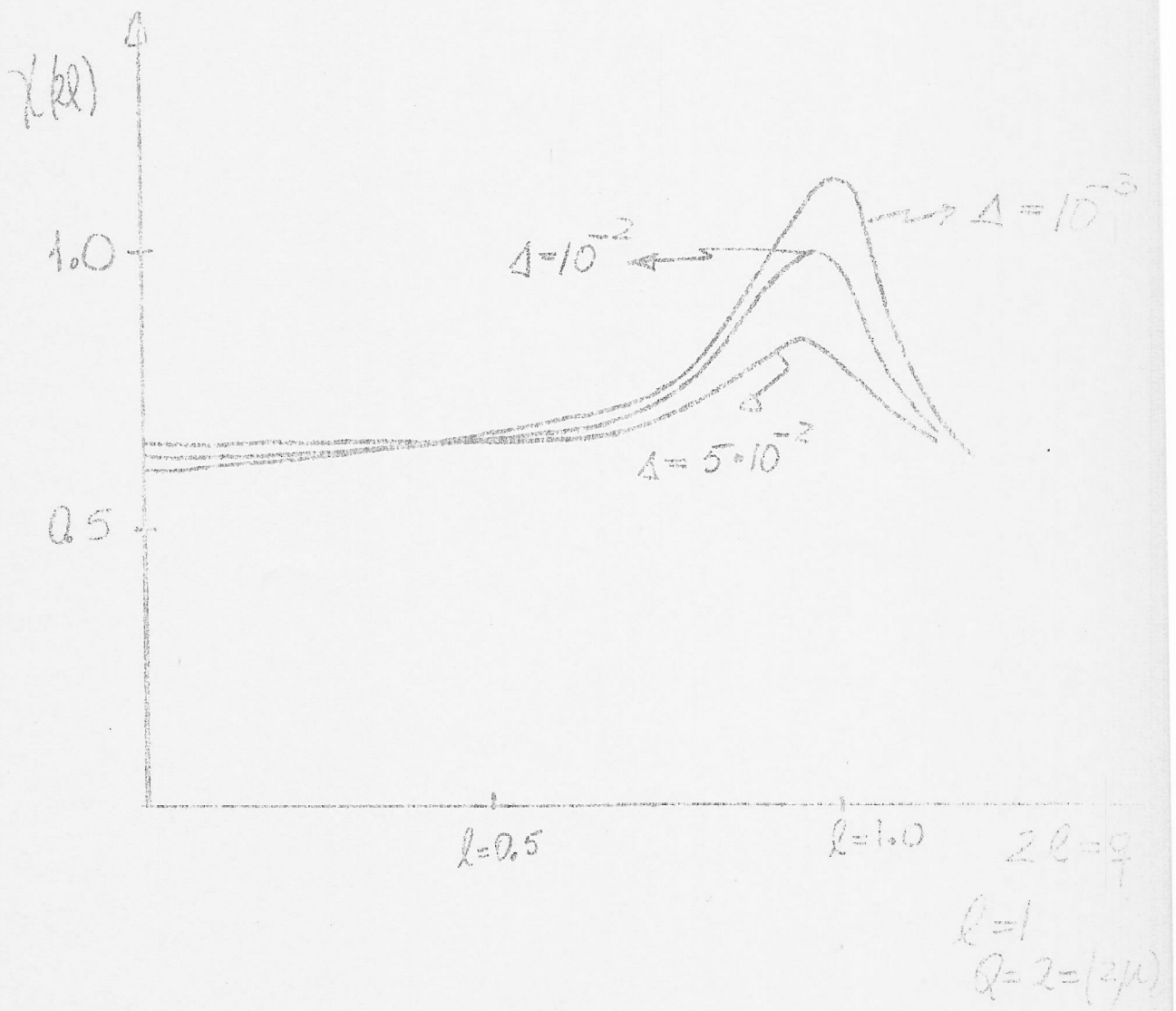


Fig. 4

Como habíamos dicho al considerar el superhuevo, K & G encuentran que la contribución del "nesting" en Q para $\chi(q)$ divergía (R $\rightarrow \infty$ en Fig. 2).

De las expresiones (3-15-16-17), el hecho que Δ sea $\neq 0$, indica que no aparece ningún tipo de divergencias. Esto junto a los argumentos ya expues por la contribución del "nesting" en Q será finito y dará el máximo de $\chi(q)$ en $q = 0$ (2-31). Por otro lado estamos considerando un modelo genérico para la S.F. más físico que el día K & G (sin aristas ni vértices "agudos").

Habiendo introducido autoconsistentemente la S.E.M. podemos conocer a posteriori el valor de Δ y el de n, buscando los pares (n, Δ) que satisfagan $\chi(q, n, \Delta) = \text{máximo}$ y también (2-30), siendo $Q = 2\pi/3.5a$.

De todos modos podemos hacernos una idea del modelo haciendo una simplificación en éste, para aprovechar una calculadora disponible.

La simplificación consiste en reemplazar la relación (3-5) por la siguiente:

$$E_k = k_x^{2M} + k_z^2 \quad (3-18)$$

la que representa un superhuevo solamente con simetría cilíndrica, luego repitiendo las edículas ahora con (3-18):

$$a) \quad \chi(ze) = \int_0^{\xi_2} d\xi F_+(\xi) - \int_0^{\xi_1} d\xi F_-(\xi); \quad l^2 \leq 1 - \Delta \quad (3-19)$$

$$b) \quad \chi(ze) = \int_0^{\xi_2} d\xi F_+(\xi); \quad 1 - \Delta \leq l^2 \leq 1 + \Delta \quad (3-20)$$

$$c) \quad \chi(ze) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} d\xi F_+(\xi) \quad l^2 \geq 1 + \Delta \quad (3-21)$$

$$\text{con } F_{\pm}(\xi) = \frac{\pi}{4e} \left(1 - l^2 - \left(\frac{\Delta}{2e} \right)^2 \text{sh}^2 \xi \mp \Delta \text{ch} \xi \right)^{1/m} \quad (3-22)$$

$$\text{sh } \xi_1 = \frac{2el}{\Delta}$$

$$h^2 = 1 + l^2 - \sqrt{\Delta^2 + 4e^2}$$

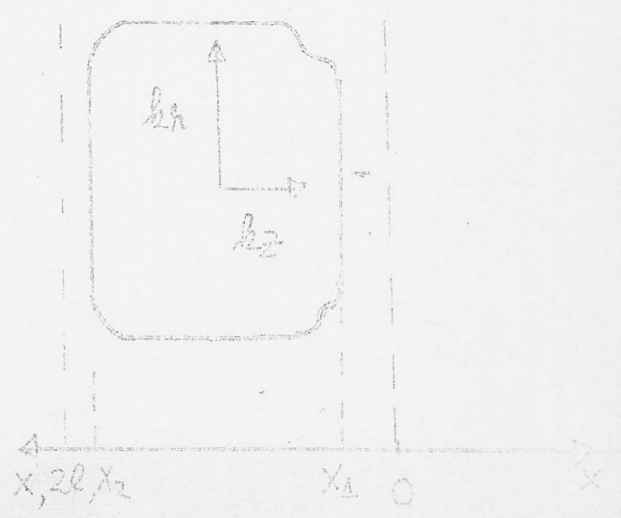
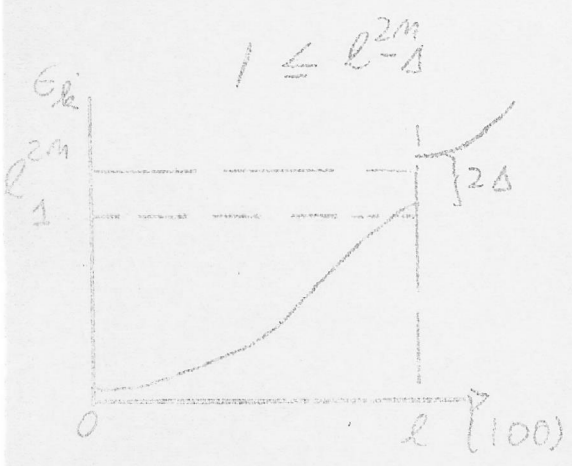
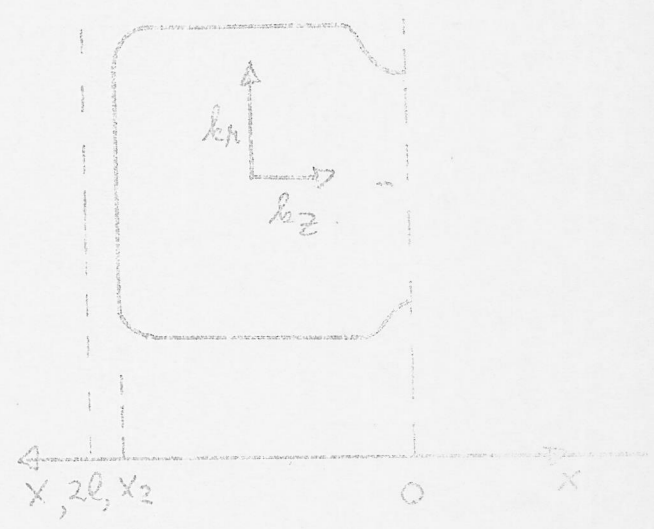
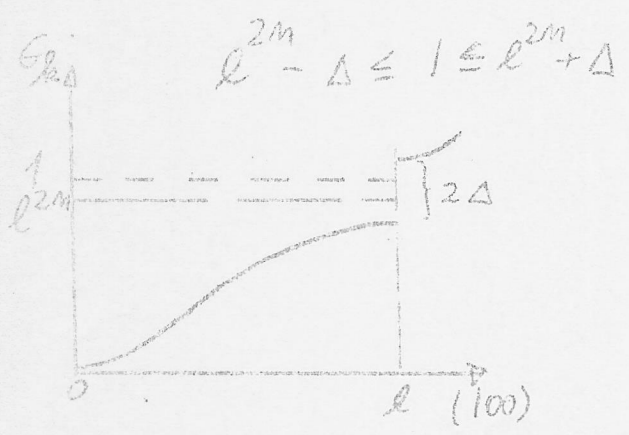
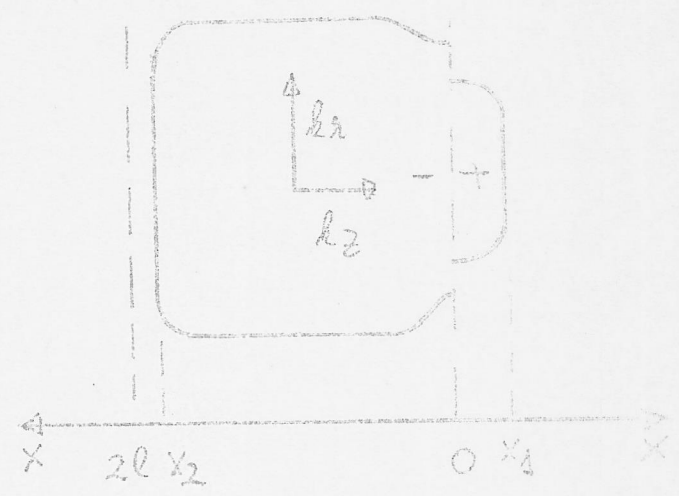
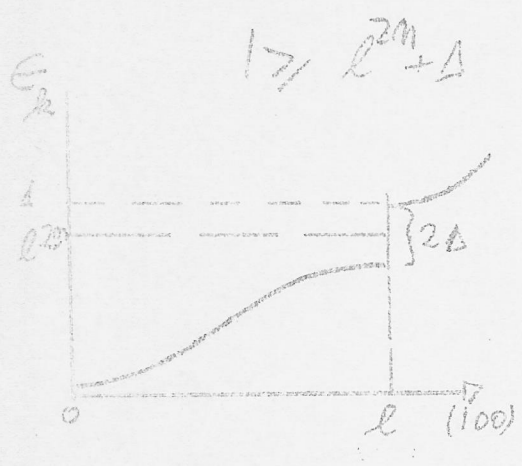
$$y \quad \text{sh } \xi_2 = \frac{2ef}{\Delta}$$

$$f^2 = 1 + l^2 + \sqrt{\Delta^2 + 4e^2} \quad (3-23)$$

Estructura de bandas en la dirección (0,0,1) (esquemática)

$$\epsilon_F = 1$$

Superficie de Fermi



iv) Fig. 3

R E F E R E N C I A S

- 1.- "Quantum theory of Magnetism" : Robert White (Mc Graw Hill)
- 2.- "Resistividad Residual en paredes de Bloch" : Guillermo Cabrera (tesis de licenciatura)
- 3.- "Introduction to Solid State Physics" : Charles Kittel (3era. ed.) Wiley & Sons
- 4.- "Fermi Surface & Antiferromagnetismo in Europium Metal" : Andersen & Loucks
Phys. Rev. V-167 N° 2 pp 551-556, March 1965
- 5.- "Fermi Surface Geometry & Antiferromagnetism Phase of Europium Metal" :
Kivi & Greene. Solid State Comm. Vol. 10, pp 717-719, 1972
- 6.- "The Temperature dependence of Magnetic ordering in the Heavy Rare Earths Metal" : Elliott & Wedgwood. Proc. Phys. Soc. 1964 Vol. 84.