



Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física Gleb Wataghin

Mário Malcolms de Oliveira

Quebra espontânea de simetria de rotação no
composto CeRhIn_5

Campinas, 2019

MÁRIO MALCOLMS DE OLIVEIRA

Quebra espontânea de simetria de rotação no composto CeRhIn_5

Dissertação apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Física, na área de Física.

Orientador: EDUARDO MIRANDA

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO MARIO MALCOLMS DE OLIVEIRA, E ORIENTADA PELO PROF. DR. EDUARDO MIRANDA.

Campinas, 2019

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin
Lucimeire de Oliveira Silva da Rocha - CRB 8/9174

OL4q Oliveira, Mário Malcolms de, 1994-
Quebra espontânea de simetria de rotação no composto CeRhIn₅ / Mário Malcolms de Oliveira. – Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: Eduardo Miranda.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin.

1. Fase nemática. 2. Férmions pesados. 3. Quebra espontânea de simetria.
I. Miranda, Eduardo, 1963-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física Gleb Wataghin. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Spontaneous rotational symmetry breaking in CeRhIn₅ compound

Palavras-chave em inglês:

Nematic phase

Heavy fermions

Spontaneous symmetry breaking

Área de concentração: Física

Titulação: Mestre em Física

Banca examinadora:

Eduardo Miranda [Orientador]

Ricardo Luís Doretto

Eric de Castro e Andrade

Data de defesa: 07-10-2019

Programa de Pós-Graduação: Física

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0002-5502-8583>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/9401328893328642>



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE Mestrado DE **MÁRIO MALCOLMS DE OLIVEIRA – RA 147324** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 07 / 10 / 2019.

COMISSÃO JULGADORA:

- **Prof. Dr. Eduardo Miranda – Orientador – DFMC/IFGW/UNICAMP**
- **Prof. Dr. Eric de Castro e Andrade – IFSC/USP**
- **Prof. Dr. Ricardo Luis Doretto – DFMC/IFGW/UNICAMP**

OBS.: Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

CAMPINAS
2019

Agradecimentos:

À minha mãe e minha avó pelo apoio durante todos esses anos de graduação e Mestrado e que entenderam minhas ausências e me apoiaram a seguir meus objetivos.

Ao Prof. Eduardo Miranda pela oportunidade de trabalhar com ele durante esses dois anos, pela amizade e pela excelente orientação, sempre me fornecendo conselhos fundamentais e estimulantes discussões tanto na pesquisa quanto na minha iniciante formação como pesquisador. Além disso, gostaria de agradecer também por me ensinar a fazer pesquisa com seriedade e comprometimento.

Ao Prof. Pascoal Pagliuso pelas estimulantes discussões principalmente sobre a física do composto nessa dissertação estudada. E também pela amizade e conselhos ao longo desses dois anos.

Aos Prof. Marcus Aguiar, Eduardo Miranda, Ricardo Doretto e Alberto Saa meu mais sincero obrigado por tornarem os anos de graduação e pós-graduação tão proveitosos, tanto pelos cursos ministrados, quanto pelos cafés e conselhos ao longo desses anos. Em particular, também gostaria de agradecer ao Prof. Guido Araújo do Instituto de Computação pelo excelente curso ministrado e por passar um pouco da sua paixão pelo o que se gosta de fazer.

Ao meu grande amigo Vitor Barroso pelas inúmeras e proveitosas discussões em física tanto sobre efeito Unhul, a qual eu sempre ficava um pouco deslumbrado e perdido, quanto pelas discussões sobre o uso do formalismo de segunda quantização em matéria condensada. Além disso, agradeço muito pela amizade ao longo desses anos, pelo suporte em momentos difíceis e os proveitosos cafés tanto nas cantinas quanto na cozinha do DFMC.

Ao meu também grande amigo Rene, meu muito obrigado por me ajudar com a parte computacional e por sempre ter paciência em me ensinar coisas básicas quando necessário. Agradeço imensamente por todo apoio e incentivo durante esses anos.

À Thaís Trevisan pela amizade e por sempre estar disposta a discutir e a me ensinar com muita paciência qualquer dúvida que eu tinha em muitos corpos e física no geral.

À todos os meus amigos ao longo desses anos, meu sincero obrigado.

À Emília e Luciana da secretaria do DFMC, muito obrigado por sempre me ajudarem quando necessário.

À dona Lúcia, meus mais sinceros obrigados por sempre colocar uma pitada de alegre nas minhas manhãs ao encontrá-la no café do DFMC e sempre comentar que o café coado era melhor que o expresso. De coração, espero que onde a senhora estiver nesse momento que esteja bem e sempre alegre como foi.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

O objetivo desse trabalho é estudar a possibilidade da formação de uma fase nemática eletrônica caracterizada pela quebra espontânea de simetria de rotação por um ângulo de 90° em torno do eixo c (simetria C_4) nos graus de liberdade eletrônicos do composto de férmions pesados CeRhIn_5 . Aplicamos uma teoria de campo médio para analisar a interação entre os momentos magnéticos dos átomos de cério primeiros e segundos-vizinhos acoplados antiferromagneticamente. Através do efeito da frustração magnética mostramos a existência de uma transição de fase magnética da fase de Néel, caracterizada pela presença da simetria C_4 , para a chamada fase C-AFM, em que essa simetria é quebrada. Em particular, essa última fase apresenta a simetria C_2 , caracterizada pela invariância do sistema por uma rotação de 180° em torno do eixo c . Além disso, mostramos que a quebra de simetria nos graus de liberdade magnético se reflete nos graus de liberdade de carga e na superfície de Fermi do composto. Mostramos também que um mecanismo puramente gerado nos graus de liberdade de carga, tendo a hibridização como parâmetro de ordem, não é capaz de gerar a quebra de simetria C_4 nesse sistema.

Abstract

This work aims to study the possibility of formation of an electronic nematic phase, which is characterized by a spontaneous breaking of the rotational symmetry by an angle of 90° about the c -axis (C_4 symmetry) in the electronic degrees of freedom of the heavy-fermion compound CeRhIn_5 . We apply mean-field theory to analyze the the nearest and next-nearest neighbors antiferromagnetic interactions between magnetic moments of cerium atom. Due to the magnetic frustration we show the existence of a magnetic phase transition from the Néel phase, characterized by the presence of the C_4 symmetry, to the so-called C-AFM phase, in which such symmetry is broken. In particular, this magnetic phase presents a C_2 symmetry, which is characterized by the system's invariance under a rotation of 180° about the z -axis. Moreover, we show the symmetry breaking in the magnetic degrees of freedom is reflected in the charge degrees of freedom and in the Fermi surface of the compound. We also show that a mechanism purely generated in the charge degrees of freedom, with the hybridization as the order parameter, is not able to break the C_4 symmetry in this system.

Sumário

Agradecimentos	5
Resumo	6
Abstract	7
1 Introdução	10
2 A anisotropia na resistividade do composto CeRhIn₅	13
2.1 Diagrama de fases do composto CeRhIn ₅	13
2.2 A anisotropia na resistividade	14
3 Um modelo mínimo para o composto CeRhIn₅	18
3.1 Características gerais da superfície de Fermi do CeRhIn ₅	18
3.1.1 Uma discussão simplificada sobre oscilações quânticas	18
3.1.2 Medidas de de Hass-van Alphen no composto CeRhIn ₅	20
3.2 Modelo <i>tight-binding</i> para o composto CeRhIn ₅ na região de altos campos magnéticos	22
3.2.1 Um pouco sobre a física dos elétrons <i>f</i> do átomo de cério	22
3.2.2 O modelo <i>tight-binding</i>	24
4 Interação no canal de carga e no canal de spin	32
4.1 Interação Coulombiana entre os elétrons <i>f</i> e <i>p</i>	32
4.2 Modelo de elétrons itinerantes	38
4.2.1 Algumas motivações experimentais	38
4.2.2 Densidade eletrônica do modelo na presença de um campo magnético externo	41
4.2.3 Modelo $\mathcal{J}_0 - \mathcal{J}_1$ para elétrons itinerantes	44
4.2.4 Fase de Néel	50
4.2.5 Fase C-AFM	53

SUMÁRIO

4.2.6	Transição de fase entre o estado de Néel e o estado C-AFM	56
4.2.7	Quebra de simetria nos graus de liberdade de carga	57
5	Conclusões	62

Capítulo 1

Introdução

Em física da matéria condensada, estados da matéria em que as escalas de energia de interação entre as partículas são dominantes em relação à escala da energia cinética dessas partículas são denominados de sistemas fortemente correlacionados[1]. Um exemplo desses sistemas são os chamados compostos de férmions pesados, em que momentos magnéticos localizados num meio metálico fortemente hibridizam com os elétrons de condução, dando origem a quase-partículas eletrônicas cuja massa efetiva excede algumas ordens de grandeza a massa do elétron. Em geral, nesses sistemas a diferença entre as escalas de energia de diferentes interações que competem entre si são pequenas, de tal maneira que o estado fundamental pode ser radicalmente modificado pela variação de parâmetros não-térmicos como pressão, campo magnético e dopagem[2]. Em particular, a baixíssimas temperaturas são observadas em vários desses sistemas transições de fase induzidas por esses parâmetros não térmicos, gerando estados supercondutores, magnéticos e a coexistência entre eles[2].

A chamada família dos compostos 115, CeMIn_5 ($M = \text{Co}, \text{Rh}, \text{Ir}$) é vastamente estudada[2, 3], principalmente devido à riqueza apresentada em seu diagrama de fases como supercondutividade, magnetismo e regiões de coexistência entre essas duas fases. Uma questão fundamental ainda em aberto nesses compostos de férmions pesados à base de cério é o papel desempenhado pelos elétrons $4f$ e seus graus de itinerância na determinação das possíveis fases desses compostos[2]. Enquanto o composto CeRhIn_5 a pressão ambiente e a temperatura zero apresenta uma fase antiferromagnética, com elétrons $4f$ do átomo de cério apresentando um caráter localizado[2], o composto CeCoIn_5 , apresenta uma fase supercondutora, com os elétrons $4f$ do átomo de cério apresentando um caráter itinerante[4].

Em particular, o composto de férmions pesados CeRhIn_5 vem sendo alvo de grande estudo nos últimos anos devido à inesperada presença de uma mudança no tamanho da superfície de

Fermi na região de campo magnético $B^* \approx 28\text{T}$ [2]. Abaixo da temperatura de Néel $T_N = 3,8\text{ K}$ e a campo magnético zero, o composto apresenta uma fase antiferromagnética incomensurada[5, 6]. À medida que um campo magnético externo na direção c é aplicado, observa-se através de medidas de de Hass van-Alphen que uma reconstrução da superfície de Fermi ocorre na região $B^* \approx 28\text{T}$ [2]. A partir desse valor de campo magnético, observa-se um aumento na superfície de Fermi do composto indicando um aumento na sua densidade de estados que deve ser proveniente de parte dos elétrons f , que se tornaram itinerantes nessa região de campos magnéticos. Uma reconstrução análoga da superfície de Fermi também ocorre no estudo do diagrama de fases desse composto sob pressão[7]. Contudo, diferentemente do efeito da pressão que tende a aumentar a hibridização entres os elétrons $4f$ mais localizados e os elétrons de condução delocalizados e, dessa maneira, torná-los mais intinerantes, um comportamento oposto seria esperado na presença do campo magnético, já que intuitivamente o campo magnético tende a localizar os elétrons $4f$ [8].

Em 2017, um estudo feito por F. Ronning e colaboradores[8] a fim de estudar propriedades de transporte do composto CeRhIn_5 na região de campo magnético $B^* \approx 28\text{T}$, com o campo magnético deslocado de 20° do eixo c do cristal, mostrou a existência de uma anisotropia na resistividade quando medida ao longo dois eixos perpendiculares do composto. Esse mesmo comportamento anisotrópico da resistividade é uma assinatura já conhecida da chamada fase nemática, reportada anteriormente tanto para compostos do tipo rutenatos[9], como por exemplo, $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$, quanto em cupratos supercondutores[10], como o $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. A chamada fase nemática é caracterizada por uma redução da simetria dos estados eletrônicos comparada à simetria da rede[8]. Em muitos sistemas, essa fase é caracterizada pela quebra da simetria de rotação por um ângulo de 90° em torno do eixo c (chamada simetria C_4) dos graus de liberdade eletrônicos do sistema, carga e momento magnético. O entendimento da origem microscópica da fase nemática é alvo de grande discussão já que sua coexistência com fases supercondutoras não convencionais já foi reportada anteriormente[11] levando ao questionamento de se ela compete ou favorece o aparecimento da supercondutividade não convencional. Por outro lado, existe também a discussão de que essas fases podem ser irrelevantes, devido ao seu aparecimento em materiais não supercondutores como $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ [9]. O composto de férmions pesados CeRhIn_5 é um interessante candidato a apresentar a fase nemática, já que esse composto também apresenta uma fase supercondutora não convencional sob pressão[2], o que possibilita o acesso e estudo de ambas as fases por parâmetros de controle independentes, podendo contribuir para um melhor entendimento de futuros experimentos que explore a possível coexistência da fase nemática e da fase supercondutora não convencional nesses compostos .

Essa dissertação está organizada da seguinte maneira: No próximo capítulo apresentaremos

de maneira detalhada as características do diagrama de fases do composto CeRhIn_5 e de sua estrutura cristalina e discutiremos a anisotropia na resistividade reportada em [8]. No capítulo seguinte (capítulo 3), apresentaremos algumas características da superfície de Fermi do composto CeRhIn_5 na presença de altos campos magnéticos e um modelo *tight-binding*[12] na ausência de correlações eletrônicas que é capaz de descrever de maneira qualitativa a superfície de Fermi do composto na região de altos campos magnéticos. Por fim, no capítulo 4 apresentaremos dois modelos interagentes: um modelo no canal de carga que não produz a quebra de simetria C_4 no sistema e um outro modelo de interação entre os momentos magnéticos dos átomos de cério que gera a quebra de simetria C_4 nos graus de liberdade eletrônicos, tanto na carga quanto no momento magnético.

Capítulo 2

A anisotropia na resistividade do composto CeRhIn₅

Nesse capítulo, apresentaremos algumas propriedades gerais da estrutura cristalina e do diagrama de fases do composto CeRhIn₅. Em seguida, discutiremos a anisotropia na resistividade do composto observada na presença de altos campos magnéticos[8] e que é a principal motivação dessa dissertação.

2.1 Diagrama de fases do composto CeRhIn₅

O composto CeRhIn₅ apresenta uma estrutura cristalina tetragonal que é caracterizada pela presença de três eixos de simetria mutuamente perpendiculares entre si, Fig.(2.1). Devido à equivalência das direções no plano basal da estrutura, dizemos que os graus de liberdade do sistema contidos nesse plano apresentam a chamada simetria C₄, isto é, o sistema é simétrico por uma rotação de 90° em torno do eixo *z*. Os átomos de cério formam uma rede quadrada no plano *ab*. Alguns átomos de Índio, denotados por In(1i), estão localizados nos centros dos quadrados de cérios e outros átomos de índio, denotados por In(4i), estão fora dos planos, como mostrado na Fig.(2.1)

O diagrama de fases do composto[2] apresenta uma grande variedade de comportamentos através da variação de diferentes parâmetros de controle como temperatura, pressão e campo magnético, Fig.(2.2). A temperatura finita, na ausência de pressão e campo magnético externo, o composto apresenta um ordenamento antiferromagnético incomensurado abaixo da temperatura de Néel igual a $T_N \approx 3.8\text{K}$. No plano P-T, Fig.(2.2a), com o aumento da pressão, T_N é gradualmente suprimida, tendendo à zero na pressão crítica $p_c = 2.5\text{GPa}$, onde o sistema somente apresenta uma

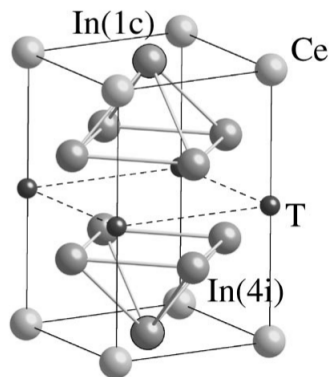


Figura 2.1: Representação esquemática da estrutura cristalina do composto CeRhIn_5 , figura retirada da Ref.[12]

fase supercondutora. Além disso, antes desse ponto crítico, existe uma região de coexistência entre a fase antiferromagnética e a fase supercondutora. Similarmente no plano B-T, Fig.(2.2b), T_N é também gradualmente suprimida com o aumento do campo magnético, indo continuamente a zero no valor crítico $B_c = 50\text{T}$. No entanto, antes de atingir esse ponto crítico, em $B^* \approx 30\text{T}$ dentro da fase antiferromagnética, há um aumento da superfície de Fermi do composto.

Para discussões posteriores dessa dissertação, uma classe de transições de fase merece destaque, as chamadas *transições de fases quânticas*. Essas transições ocorrem a temperatura zero e são induzidas por parâmetros de controle como pressão, dopagem e campo magnético. Apesar de experimentalmente não atingirmos a temperatura do zero absoluto, em muitas realizações experimentais a baixíssimas temperaturas a física do estado fundamental do sistema é relevante para a descrição de suas propriedades. Em particular, no diagrama de fases do composto CeRhIn_5 , Fig.(2.2), a temperatura e campo magnético zero, o sistema é ordenado antiferromagneticamente, sendo esse ordenamento suprimido no valor crítico $B_c = 50\text{T}$. Além disso, antes de atingir esse ponto crítico, em $B^* \approx 28\text{T}$, observa-se o aumento da superfície de Fermi do composto dentro da fase antiferromagnética. É nessa região que se concentram as discussões realizadas nessa dissertação.

2.2 A anisotropia na resistividade

Com o intuito de analisar o comportamento da resistividade do composto CeRhIn_5 na presença de altos campos magnéticos, F. Ronning e colaboradores [8] aplicaram um campo magnético deslocado de 20° em relação ao eixo c do cristal (eixo z), de tal maneira que a componente desse campo no plano basal da estrutura (H_{ip}) fosse paralela a um dos eixos de simetria desse plano.

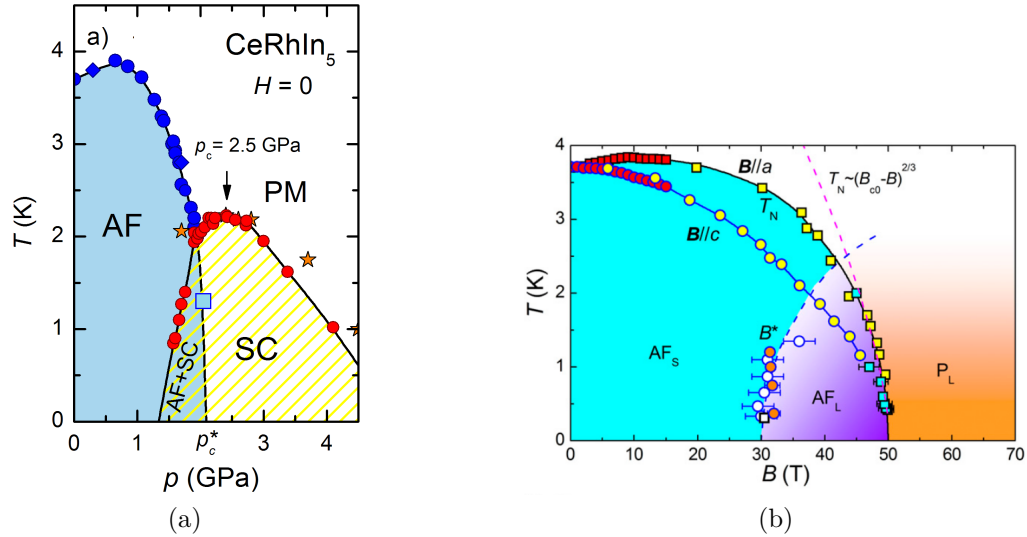


Figura 2.2: Diagrama de fases do composto CeRhIn_5 : (a) Temperatura como função da pressão[7]; (b) Temperatura como função do campo magnético[13].

Eles mediram a resistividade tanto no eixo do cristal no qual havia a componente do campo aplicada paralelamente quanto no eixo perpendicular a esse. A Fig.(2.3) nos mostra que na região de campo magnético $B^* \approx 28$ T há o aparecimento de uma anisotropia na resistividade medida em dois eixos perpendiculares do cristal tanto entre os eixos $[100]$ e $[010]$ quanto entre os eixos $[110]$ e $[1\bar{1}0]$. A partir do valor de campo magnético B^* , a resistividade no eixo do cristal em que há uma componente do campo aplicada (H_{ip}) decai, enquanto no eixo perpendicular, a resistividade cresce, sendo que essa anisotropia desaparece concomitantemente ao desaparecimento do ordenamento antiferromagnético do composto em $B_c = 50$ T. Em outras palavras, no plano da amostra, o eixo paralelo à componente planar do campo magnético apresenta menor valor de resistência ao eixo perpendicular. Além disso, quando a componente planar do campo magnético aplicado (H_{ip}) é rodada de um eixo para outro, o mesmo comportamento anisotrópico na resistividade é observado.

A fim de simplificar a comparação entre diferentes geometrias e amostras e eliminar possíveis efeitos de geometria, F. Ronning e colaboradores obtiveram a razão entre a resistividade ao longo da direção com a componente planar do campo aplicada e a resistividade na direção perpendicular a ela, $\rho_{//}/\rho_{\perp}$, como mostrado na Fig.(2.4). Baseados nesse resultado, eles concluíram que para diferentes amostras do composto CeRhIn_5 , a anisotropia na resistividade de fato aparece em B^* e sucessivamente descece para campos magnéticos mais altos, desaparecendo na fronteira da fase antiferromagnética do composto em B_c . Quanto aos efeitos de temperatura no comportamento mostrado na Fig.(2.4a), eles observaram que a anisotropia na resistividade descece sucessivamente

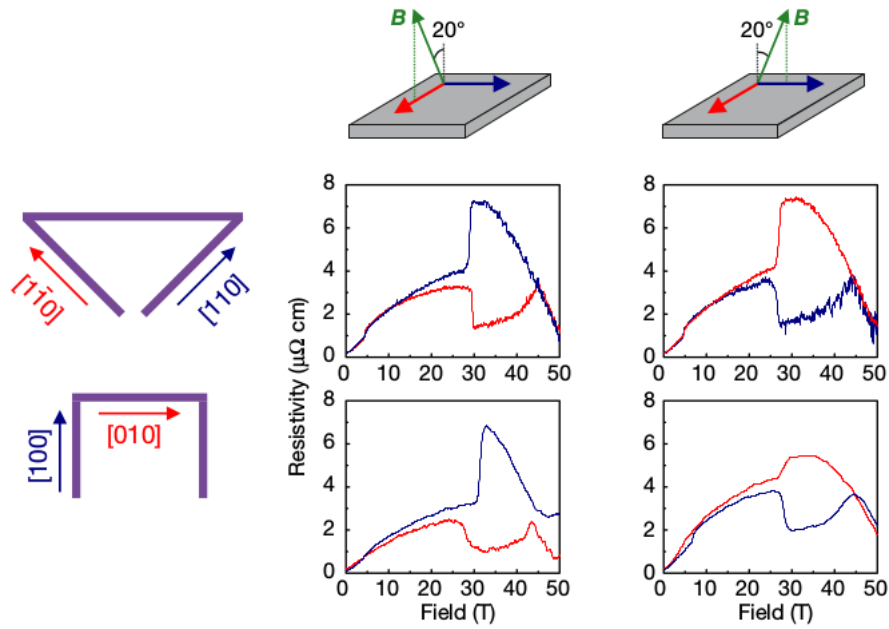


Figura 2.3: Comportamento da resisitividade a 500 mK na presença de um campo magnético deslocado de 20° em relação ao eixo c . Ambas as linhas correspondem ao esquema desenhado à esquerda, e as cores das curvas de resistência correspondem aos eixos de cada dispositivo como indicado pelas setas coloridas. A linha superior (inferior) corresponde ao canal de simetria B_{1g} (B_{2g}). A coluna da esquerda (direita) possui a componente do campo magnético no plano do dispositivo alinhada ao longo do eixo vermelho (azul). Figurada retirada da Ref.[8].

com o aumento da temperatura, sendo praticamente suprimida em $T = 2.2$ K, como mostrado na Fig.(2.4b). Dessa maneira, eles concluíram que a anisotropia na resistividade é um efeito acentuado a baixas temperaturas.

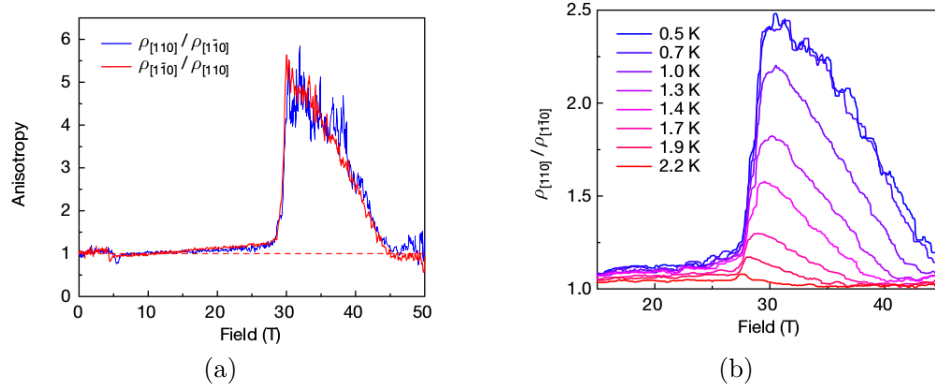


Figura 2.4: (a) Anisotropia na resistividade no plano em 500 mK, definida como a razão entre as resistividades apresentando maior e menor resistências. A anisotropia salta no valor de $B^* \approx 28$ T, e gradualmente vai a zero com o aumento do campo magnético. (b) Dependência da anisotropia com a temperatura. Com o aumento da temperatura, a anisotropia diminui até não se tornar mais observável acima de $T = 2.2$ K. Figuras retiradas da Ref.[8]

Baseados nos resultados obtidos por F. Ronning e colaboradores [8], assumiremos nessa dissertação que, devido ao fato de que a assinatura da anisotropia na resistividade tende a ser acentuada a baixas temperaturas, esse efeito pode ser tratado como uma transição de fase quântica. Além disso, como essa anisotropia é observada entre dois eixos perpendiculares no plano basal do cristal, assumiremos que essa transição é caracterizada pela quebra de simetria de rotação de um ângulo de 90° em torno do eixo z dos estados eletrônicos do sistema, ou seja,

$$|\psi\rangle \neq e^{iJ_z\pi/2} |\psi\rangle, \quad (2.1)$$

onde J_z denota o operador de momento angular total na direção z , e $|\psi\rangle$ representa o estado do sistema. Em outras palavras, trataremos o problema como uma transição de fase quântica caracterizada pela quebra espontânea da simetria C_4 dos estados eletrônicos do sistema.

Capítulo 3

Um modelo mínimo para o composto CeRhIn₅

Nesse capítulo, apresentaremos um possível modelo tight-binding mínimo, sem correlações eletrônicas, que descreve de maneira qualitativa o comportamento da superfície de Fermi (FS) do composto CeRhIn₅ na presença de altos campos magnéticos. Iniciaremos discutindo as principais propriedades da superfície de Fermi do composto obtidas através de medidas de oscilações quânticas (de Haas-van Alphen)[2] e sua similaridade com a superfície de Fermi do composto CeCoIn₅ na presença de altos campos magnéticos. Logo em seguida, discutiremos de maneira detalhada um modelo tight-binding proposto para o composto CeCoIn₅[12] e sua extensão para o nosso caso de interesse.

3.1 Características gerais da superfície de Fermi do CeRhIn₅

3.1.1 Uma discussão simplificada sobre oscilações quânticas

Na presença de um campo magnético externo, os elétrons na superfície de Fermi de um metal descrevem órbitas com frequências e área de seção quantizadas na direção perpendicular ao campo aplicado, Fig.(3.1a), enquanto na direção paralela a esse campo, o movimento se mantém inalterado. Com isso, as órbitas eletrônicas permitidas ao longo da direção do campo magnético aplicado se encontram nos chamados *tubos de Landau*, Fig.(3.1b) .

A formação dos tubos de Landau, na presença do campo magnético externo, implica que a superfície de Fermi não seja (quasi)contínua, e sim formada por estados ao longo desses tubos. Consequentemente, a densidade de estados apresentará esse mesmo comportamento. Além disso,

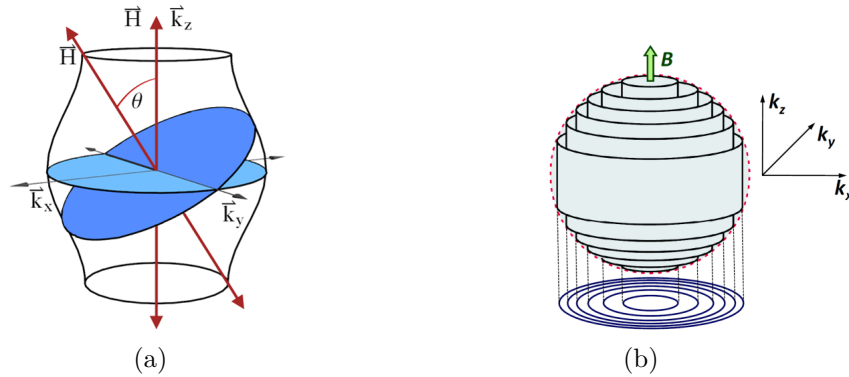


Figura 3.1: (a) Ilustração das órbitas e área de seção descritas pelos elétrons de um metal na presença de um campo magnético externo[14]. (b) Ilustração dos tubos de Landau formados na superfície de Fermi de um metal (linhas tracejadas) com projeção em 2D[14].

como a área de seção das órbitas eletrônicas é diretamente proporcional à intensidade do campo magnético aplicado, à medida que a intensidade do campo cresce, alguns tubos "atravessam" a superfície de Fermi produzindo modulações na densidade de estados na superfície de Fermi do metal.

Grande parte das propriedades de um metal, como o calor específico, a magnetização e a susceptibilidade magnética, depende da densidade de estados em torno da superfície de Fermi. Como resultado, é então esperado que essas grandezas também apresentem oscilações com a variação do campo magnético externo. A frequência dessas oscilações, à medida que campo magnético varia, é dada por[15]

$$\nu = \frac{1}{\Delta(1/B)} = \frac{A_{ext}}{2\pi e}, \quad (3.1)$$

onde A_{ext} denota a área extremal da superfície de Fermi, Fig.(3.1a), e denota a carga do elétron e $\Delta(1/B)$ representa a variação do inverso do módulo do campo externo aplicado. Logo, com base em (3.1), concluímos que uma vez que temos acesso às frequências de oscilação de uma dada propriedade do metal como função da variação do inverso do campo magnético aplicado, podemos mapear as áreas extremas perpendiculares à direção do campo aplicado da superfície de Fermi do material e, variando a direção do campo aplicado, podemos reconstruir sua topologia.

Em particular, na próxima seção, focaremos nas informações obtidas através de um dos fenômenos de oscilações quânticas mais estudados em metais, o chamado efeito *de Haas-van Alphen*,

que consiste na oscilação da magnetização de um metal como função da variação do campo magnético aplicado.

3.1.2 Medidas de de Haas-van Alphen no composto CeRhIn₅

Uma das grandes questões em aberto sobre a física do composto CeRhIn₅ e dos compostos à base de cério em geral é o papel dos elétrons $4f$ e seu grau de itinerância. Para exemplificarmos, à pressão ambiente, os elétrons $4f$ do átomo de cério no composto CeRhIn₅ possuem um caráter localizado[16], enquanto que no composto CeCoIn₅ eles apresentam um caráter itinerante[4]. Se analisarmos os elementos Co e Rh, vemos que eles pertencem ao mesmo grupo na tabela periódica, implicando assim que possuem o mesmo número de elétrons de valência. Além disso, o raio atômico do átomo de Rh é maior do que o raio atômico do átomo de Co, devido ao fato de apresentar uma camada eletrônica extra. Logo, devido a essas similaridades entre os átomos de Co e Rh, é esperado que *em certos regimes*, como por exemplo na presença de altos campos magnéticos, os compostos CeCoIn₅ e CeRhIn₅ apresentem propriedades eletrônicas semelhantes.

A fim de estudar as propriedades do composto CeRhIn₅ através de medidas do efeito de de Haas-van Alphen na presença de baixos e altos campos magnéticos e a baixas temperaturas, L. Jiao e colaboradores[2] observaram primeiramente que, para baixos valores de campo magnético (B) aplicado paralelamente ao eixo c do cristal, os picos no espectro de frequências do composto, Fig.(3.2b), são semelhantes aos picos observados no espectro do composto LaRhIn₅[17]. Como não existem elétrons $4f$ no composto LaRhIn₅, eles inferiram que nessa região de campo magnético os elétrons $4f$ no composto CeRhIn₅ possuem um caráter localizado, não contribuindo assim para a densidade de estados na superfície de Fermi. Entretanto, para valores acima de $B^* = 30$ T, eles observaram o aparecimento de novas frequências características denotadas por α'_2 (5000 T), α'_1 (5700 T) e β'_1 (11900 T) na Fig.(3.2a). Como essas frequências características só aparecem para valores de campo magnético acima de B^* , eles inferiram que o surgimento dessas novas frequências é resultado de uma expansão da superfície de Fermi nessa região de campo magnético. Além disso, eles notaram uma semelhança entre as novas frequências características obtidas com as frequências características do composto CeCoIn₅, Fig.(3.2c), denotadas na literatura por α e β [4]. Como no CeCoIn₅, os elétrons $4f$ do átomo de cério apresentam um caráter itinerante, eles inferiram que o aparecimento dessas frequências características acima de B^* é resultado da delocalização de parte dos elétrons $4f$ do átomo de cério, que agora contribuem para a densidade de estados na superfície de Fermi.

Com o intuito de mapear a topologia da superfície de Fermi do composto CeRhIn₅, L. Jiao

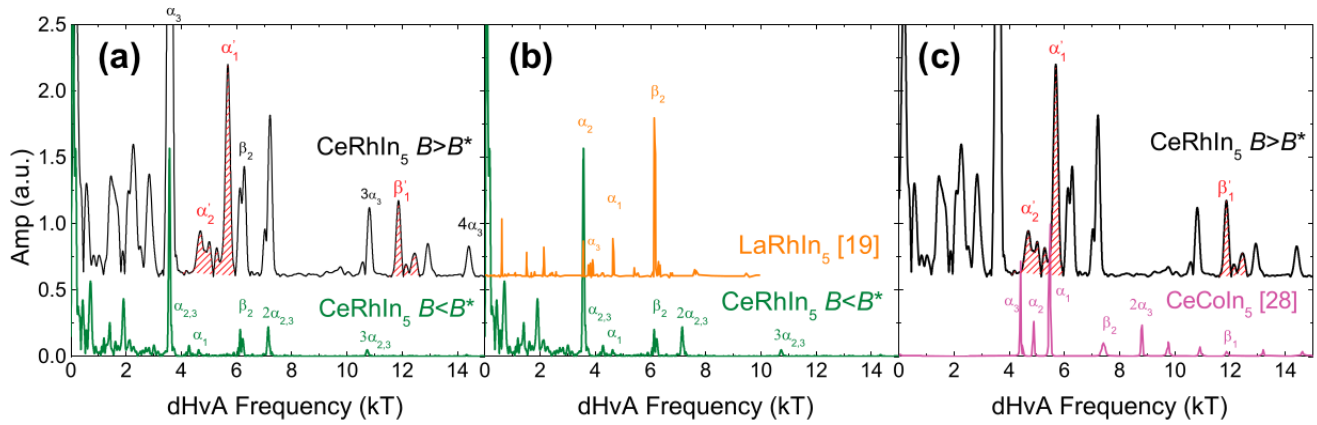


Figura 3.2: Comparação do espectro de frequência das medidas de de Hass-van Alphen para B paralelo ao eixo c do cristal, no caso (a) $B < B^*$ e $B > B^*$ para o composto CeRhIn_5 [2]; (b) CeRhIn_5 ($B < B^*$), e LaRhIn_5 [17]; (c) CeRhIn_5 ($B > B^*$), e CeCoIn_5 [4].

e colaboradores analisaram a dependência angular das frequências obtidas através das medidas de de Hass-van Alphen no plano ac do cristal. Eles observaram as oscilações quânticas para diferentes valores de θ , onde θ é o ângulo entre o campo magnético aplicado e o eixo c do cristal, e compararam com a mesma medida obtida anteriormente para o composto CeCoIn_5 [3], Fig.(3.3). Com base nesses resultados, eles concluíram que a dependência das frequências com o ângulo θ para o CeRhIn_5 é aproximadamente da forma $1/\cos(\theta)$ que é a mesma dependência das áreas maximais de um cilindro, inferindo assim que a superfície de Fermi desse composto é quase-cilíndrica ou, equivalentemente, quase-bidimensional. O termo quase se deve ao fato de que algumas frequências apresentam uma pequena dependência com o valor do campo aplicado ao longo do eixo c do cristal, indicando que as bandas de energia que as geram possuem uma fraca dependência com a direção k_z no espaço recíproco, o que justifica o pequeno desvio do comportamento $1/\cos(\theta)$ observado para algumas frequências na Fig.(3.3).

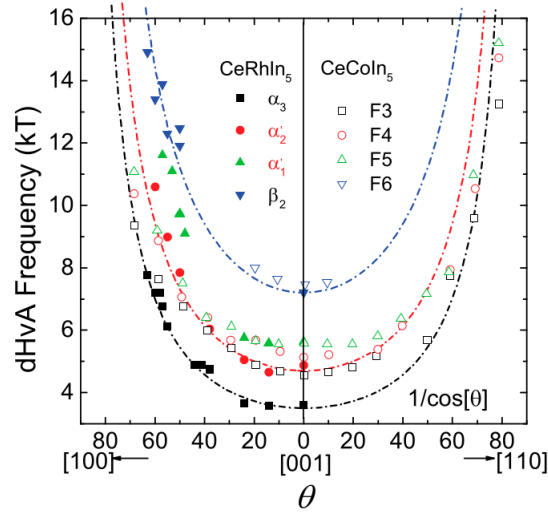


Figura 3.3: Comparação da dependência angular das frequências de de Haas-van Alphen dos compostos CeRhIn₅[2] e CeCoIn₅[18].

3.2 Modelo *tight-binding* para o composto CeRhIn₅ na região de altos campos magnéticos

Nessa seção, discutiremos o modelo *tight-binding* proposto por Takashiro Maehira e colaboradores[12], que captura de maneira qualitativa as principais características da superfície de Fermi dos compostos CeCoIn₅ e CeIrIn₅. Ambos os compostos apresentam um estado fundamental supercondutor[19, 20], diferentemente do CeRhIn₅, cujo estado fundamental é ordenado antiferromagneticamente[5, 6]. Contudo, como discutido na seção anterior, na presença de altos campos magnéticos ($B > B^*$) a superfície de Fermi do composto CeRhIn₅ se assemelha à superfície de Fermi do composto CeCoIn₅[2], justificando assim o uso desse modelo para descrição da física desse composto nessa região de campo magnético.

3.2.1 Um pouco sobre a física dos elétrons f do átomo de cério

Um aspecto importante para a construção de um modelo *tight-binding* para compostos à base de cério é o fato de que os elétrons da camada $4f$ desse átomo estão sujeitos a uma forte interação spin-órbita descrita por

τ	σ	μ
a	\uparrow	$-5/2$
a	\downarrow	$5/2$
b	\uparrow	$3/2$
b	\downarrow	$-3/2$
c	\uparrow	$-1/2$
c	\downarrow	$1/2$

Tabela 3.1: Relação dos "pseudo" spins τ com projeção σ e os estados de momento angular $j = 5/2$ com projeção μ na direção z .

$$H_{SO} \propto \vec{S} \cdot \vec{L}, \quad (3.2)$$

onde \vec{S} e \vec{L} denotam os vetores de spin e momento angular orbital totais do elétron, respectivamente. Devido a esse acoplamento, o número quântico adequado para a descrição do estado eletrônico de partícula única é o momento angular total \vec{J} , dado por

$$\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}. \quad (3.3)$$

Como na camada $4f^1$, com apenas um elétron (apropriado para a valência do Ce^{3+}), o momento angular orbital é $\ell = 3$ e o spin eletrônico é $s = 1/2$, de acordo com a teoria de adição de momento angular[21] temos dois multipletos, um cujo momento angular total é $j = 7/2$, e outro cujo momento angular total é $j = 5/2$.

Como estamos interessados em descrever o setor de baixas energias do sistema, de acordo com a regra de Hund[15] o multipletto de menor energia corresponde a $j = 5/2$ e, por essa razão, consideraremos somente esse multipletto para descrever os graus de liberdade dos elétrons f . Devido à simetria de reversão temporal dos estados que compõem o sexteto $j = 5/2$, $\mu = -5/2, -3/2, \dots, 5/2$, onde μ denota a projeção do momento angular j na direção z , classificamos esses estados em três pares de "pseudo" spins denotados por τ , onde $\tau = a, b$ ou c , e com projeções σ , com $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow e cuja relação com os estados originais de momento angular total é mostrado na tabela 3.1.

3.2.2 O modelo *tight-binding*

Uma vez estabelecida a base de momento angular total para a descrição adequada do problema, Maehira e colaboradores[12] propuzeram um modelo *tight-binding* bidimensional, inspirados no modelo periódico de Anderson[22], considerando somente os orbitais $4f$ do átomo de cério e $5p$ do átomo de índio, como ilustrado na Fig.(4.5).

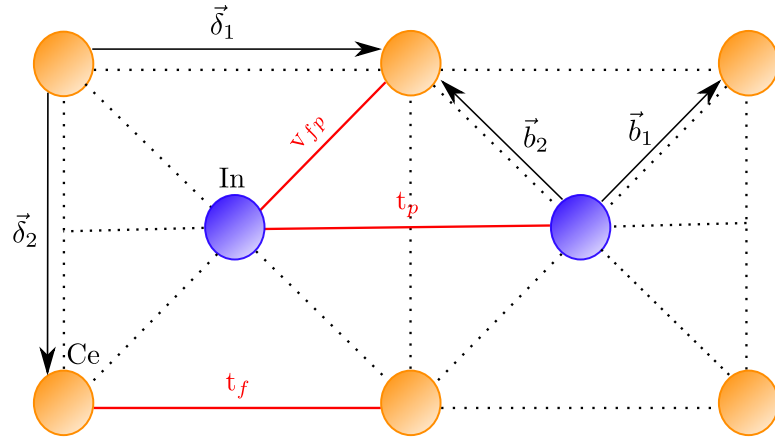


Figura 3.4: Representação esquemática da rede bidimensional composta por átomos de cério (laranja) e átomos de índio (azul). Os parâmetros t_f , t_p e V_{fp} denotam o termo de *hopping* entre os elétrons f , o termo de *hopping* entre os elétrons p e o termo de hibridização entre os elétrons f e p , respectivamente. $\vec{\delta}$ é o vetor que conecta átomos semelhantes, isto é, Ce-Ce e In-In, e \vec{b} denota o vetor que conecta átomos diferentes, Ce-In,

O Hamiltoniano que descreve o sistema é dado por

$$H = H_f + H_p + H_{fp} + H_{CEF} + H_U, \quad (3.4)$$

onde primeiro e o segundo termo se referem ao *hopping* dos elétrons f e p , respectivamente, enquanto que o terceiro termo denota a hibridização entre os elétrons f e p . O quarto termo inclui o efeito do campo cristalino da estrutura tetragonal do composto e o quinto termo representa a repulsão Coulombiana local, que existe quando dois elétrons f ocupam o mesmo sítio. Em segunda quantização, no espaço real, o Hamiltoniano (3.4) é expresso como

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\vec{i}, n, \tau, \tau', \sigma} t_{f\tau\tau'}^{\vec{\delta}_n} f_{\vec{i}, \tau, \sigma}^\dagger f_{\vec{i} + \vec{\delta}_n, \tau', \sigma} + \sum_{\vec{i}, n, \vec{\delta}_n, \lambda, \lambda', \sigma} t_{p\lambda\lambda'}^{\vec{\delta}_n} c_{\vec{i}, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{i} + \vec{\delta}_n, \lambda', \sigma} + \sum_{\vec{i}, n, \vec{b}, \tau, \lambda, \sigma} V_{\tau\lambda\sigma}^{\vec{b}_n} f_{\vec{i}, \tau, \sigma}^\dagger c_{\vec{i} + \vec{b}_n, \lambda, \sigma} \\
 & + \sum_{\vec{i}, \tau, \tau', \sigma} B_{\tau\tau'} f_{\vec{i}, \tau, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \tau', \sigma} + \Delta \sum_{\vec{i}, \lambda, \sigma} c_{\vec{i}, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}, \lambda, \sigma} + U \sum_{\vec{i}, \tau, \tau', \sigma, \sigma'} f_{\vec{i}, \tau, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \tau, \sigma} f_{\vec{i}, \tau', \sigma'}^\dagger f_{\vec{i}, \tau', \sigma'}, \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

onde $f_{\vec{i}, \tau, \sigma}$ é o operador de destruição fermiônico para os elétrons f no sítio \vec{i} com pseudo spin τ e projeção σ , $c_{\vec{i}, \lambda, \sigma}$ é o operador de destruição fermiônico para os elétrons p no sítio \vec{i} com pseudo spin λ e projeção σ . Os parâmetros $t_{f\tau\tau'}^{\vec{\delta}}$, $t_{p\lambda\lambda'}^{\vec{\delta}}$ e $V_{\tau\lambda\sigma}^{\vec{b}}$ denotam os elementos de matriz de *hopping* dos elétrons f , de *hopping* dos elétrons p e de hibridização dos elétrons f e p , respectivamente. O termo $B_{\tau\tau'}$ denota os elementos de campo cristalino e Δ representa o nível de energia dos orbitais p medido em relação ao nível de energia do orbital f . O último termo U representa a intensidade da interação Coulombiana local entre os elétrons f .

Diferentemente dos elétrons $4f$ do átomo de cério, os elétrons $5p$ do átomo de índio não estão sujeitos a uma forte interação spin-órbita. Dessa forma, tanto o número quântico de spin s quanto o número quântico de momento angular orbital ℓ são bons números quânticos para a descrição do estado de partícula única que descrevem esses elétrons. Além disso, como o sistema de interesse é bidimensional, os processos de *hopping* ocorrem no plano $x-y$ e, portanto, devemos desconsiderar os orbitais p_z que correspondem à projeção $m_\ell = 0$ do momento angular orbital na direção z . Contudo, devido à mistura entre os estados eletrônicos f e p do sistema ocasionada pelo termo de hibridização, os estados que descrevem os elétrons p também devem ser expressos em termos de pseudo spins, cuja relação com os estados de momento angular orbital e de spin é mostrada na tabela 3.2.

λ	σ	m_ℓ	m_s
a	\uparrow	1	1/2
a	\downarrow	-1	-1/2
b	\uparrow	-1	1/2
b	\downarrow	1	-1/2

Tabela 3.2: Relação dos "pesudo" spins λ com projeção σ e os estados de momento angular orbital $\ell = 1$ e spin $s = 1/2$ com projeção m_ℓ e m_s na direção z , respectivamente.

As matrizes de hopping dos elétrons f entre os pseudo orbitais τ e τ' conectados pelos vetor

$\vec{\delta}_{1/2}$ com $\vec{\delta}_1 = (1, 0)$ e $\vec{\delta}_2 = (0, 1)$ são dadas por[12]

$$t_{f\tau\tau'}^{\hat{x}} = \frac{3}{56}(ff\sigma) \begin{pmatrix} 5 & \sqrt{5} & -\sqrt{10} \\ \sqrt{5} & 1 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{10} & -\sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}, \quad t_{f\tau\tau'}^{\hat{y}} = \frac{3}{56}(ff\sigma) \begin{pmatrix} 5 & \sqrt{5} & \sqrt{10} \\ \sqrt{5} & 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{10} & \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

onde $(ff\sigma)$ denota a integral de Slater-Koster[23] entre orbitais f através de uma ligação σ . As matrizes de hopping dos elétrons p entre os pseudo orbitais λ e λ' conectados pelos vetores $\vec{\delta}_1$ e $\vec{\delta}_2$, definidos anteriormente, são dadas por

$$t_{p\lambda\lambda'}^{\hat{x}} = \frac{(pp\sigma)}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad t_{p\lambda\lambda'}^{\hat{y}} = \frac{(pp\sigma)}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

onde $(pp\sigma)$ denota a integral de Slater-Koster entre orbitais p através de uma ligação σ . A matriz de hibridização entre os elétrons f e p é dada por

$$V_{\tau\tau'\uparrow}^{\vec{b}} = V_{\tau\tau'} = \frac{(fp\sigma)}{4\sqrt{7}} \begin{pmatrix} \sqrt{15} & i\sqrt{15} \\ -\sqrt{3} & -i\sqrt{3} \\ i\sqrt{6} & -\sqrt{6} \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

para $\vec{b}_1 = (1/2, 1/2)$, onde \vec{b}_1 é o vetor que conecta átomos vizinhos de cério e índio e $(fp\sigma)$ denota a integral de Slater-Koster entre orbitais f e p através de uma ligação σ . Para $\vec{b}_2 = (1/2, -1/2)$, temos que $V_{\tau\tau'\uparrow}^{\vec{b}} = V_{\tau\tau'}^*$, e para pseudo spins com projeção *down*, temos que $V_{\tau\tau'\downarrow}^{\vec{b}} = \left(V_{\tau\tau'\uparrow}^{\vec{b}}\right)^*$. Detalhes sobre a derivação dos elementos de matriz hopping e de hibridização podem ser encontrados em[24]. Por fim, para estados de momento angular total $j = 5/2$ e a estrutura tetragonal, os elementos de matriz do campo cristalino são dados por[25]

$$\begin{aligned} B_{aa} &= 10B_2^0 + 60B_4^0, \\ B_{bb} &= -2B_2^0 - 180B_4^0, \\ B_{cc} &= -8B_2^0 + 120B_4^0, \\ B_{ab} &= B_{ba} = 12\sqrt{5}B_4^4, \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde B_p^q são os chamados parâmetros de campo cristalino.

A fim de determinar os valores das integrais de Slater-Koster, $(ff\sigma)$, $(pp\sigma)$ e $(fp\sigma)$, e do parâmetro Δ , Takahiro Maehira e colaboradores[12] extraíram esses valores através da comparação do modelo *tight-binding* com os resultados por eles obtidos através de um cálculo de estrutura de bandas (método APW, do inglês, *argumented plane-wave*). Por outro lado, os valores dos parâmetros de campo cristalino para o CeRhIn₅ foram extraídos da Ref.[26]. Por questão de conveniência, definimos $t_p \equiv (pp\sigma)$, $t_f \equiv \frac{3}{28}(ff\sigma)$ e $V_{fp} \equiv \sqrt{\frac{3}{7}}(fp\sigma)$, e adotamos o hopping t_p dos elétrons p como a escala de energia do sistema. Os valores desses parâmetros se encontram na tabela 3.3.

	(K)	($10^{-3}eV$)	($10^{-3}t_p$)
t_p	5730	500	1000
$(ff\sigma)$	4400	390	770
$(fp\sigma)$	5360	470	940
t_f	471.43	40	80
V_{fp}	2025,9	180	350
Δ	2300	200	400
B_2^0	-10.76	0.95	-1.9
B_4^0	0.6	0.05	0.1
B_4^4	1.48	0.13	0.26
B_{aa}	-71.5	-6.25	-12.5
B_{bb}	-87.1	-7.6	-15.2
B_{cc}	158.5	13.85	27.7
B_{ab}	39.8	3.45	6.9

Tabela 3.3: Valores dos parâmetros do modelo *tight-binding* obtidos por comparação com cálculo de teoria de bandas (APW)[12], e para os parâmetros de campo cristalino[26] em diferentes escalas de energia.

Por fim, devido à forte repulsão Coulombiana local entre os elétrons f do átomo de cério, consideramos o chamado limite de U muito grande, em outras palavras, que a intensidade dessa interação Coulombiana entre os elétrons f é muito maior do que a escala de energia do nosso sistema ($U \gg t_p$). Nesse regime, implementamos a ocupação $n_f = 1$ numa abordagem de campo médio,

$$\sum_{\vec{i},\tau,\sigma} \langle f_{i\tau\sigma}^\dagger f_{i\tau\sigma} \rangle = 1, \quad (3.10)$$

e ignoramos o último termo do Hamiltoniano (3.5), que se reduz a

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\vec{i},n,\tau,\tau',\sigma} t_{f\tau\tau'}^{\vec{\delta}_n} f_{i,\tau,\sigma}^\dagger f_{i+\vec{\delta}_n,\tau',\sigma} + \sum_{\vec{i},n,\lambda,\lambda',\sigma} t_{p\lambda\lambda'}^{\vec{\delta}_n} c_{i,\lambda,\sigma}^\dagger c_{i+\vec{\delta}_n,\lambda',\sigma} + \sum_{\vec{i},n,\tau,\lambda,\sigma} V_{\tau\lambda\sigma}^{\vec{b}_n} f_{i,\tau,\sigma}^\dagger c_{i+\vec{b}_n,\lambda,\sigma} \\ & + \sum_{\vec{i},\tau,\tau',\sigma} B_{\tau\tau'} f_{i,\tau,\sigma}^\dagger f_{i,\tau',\sigma} + \Delta \sum_{\vec{i},\lambda,\sigma} c_{i,\lambda,\sigma}^\dagger c_{i,\lambda,\sigma}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Como estamos interessados em analisar as bandas de energia do sistema descrito por (3.11), escrevemos os operadores de destruição fermiônicos para os elétrons f e p no espaço do momento através da transformada de Fourier

$$f_{j,\tau,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j} f_{\vec{k},\tau,\sigma}, \quad (3.12)$$

$$c_{j,\lambda,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j} c_{\vec{k},\lambda,\sigma}, \quad (3.13)$$

onde N denota o número de células unitárias do sistema, e o vetor \vec{R}_j denota a posição do sítio j . Usando a relação

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{j}} e^{i(\vec{k}-\vec{p})\cdot\vec{R}_j} = \delta_{\vec{k},\vec{p}}, \quad (3.14)$$

expressamos o Hamiltoniano (3.11) no espaço de momento como

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\vec{k},\tau,\tau',\sigma} \left(\varepsilon_{k\tau\tau'}^f + B_{\tau\tau'} \right) f_{\vec{k},\tau,\sigma}^\dagger f_{\vec{k},\tau',\sigma} + \sum_{\vec{k},\lambda,\lambda',\sigma} \left(\varepsilon_{k\lambda\lambda'}^p + \Delta \delta_{\lambda\lambda'} \right) c_{\vec{k},\lambda,\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\lambda',\sigma} \\ & + \sum_{\vec{k},\tau,\lambda,\sigma} \left(V_{k\tau\lambda} f_{\vec{k},\tau,\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\lambda,\sigma} + h.c. \right), \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde a dispersão dos elétrons f é dada por

$$\varepsilon_{\vec{k}\tau\tau'}^f = \frac{3(ff\sigma)}{28} \begin{pmatrix} 5\epsilon_{\vec{k}} & \sqrt{5}\epsilon_{\vec{k}} & -\sqrt{10}\gamma_{\vec{k}} \\ \sqrt{5}\epsilon_{\vec{k}} & \epsilon_{\vec{k}} & -\sqrt{2}\gamma_{\vec{k}} \\ -\sqrt{10}\gamma_{\vec{k}} & -\sqrt{2}\gamma_{\vec{k}} & 2\epsilon_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

com $\epsilon_{\vec{k}} = \cos(k_x) + \cos(k_y)$ e $\gamma_{\vec{k}} = \cos(k_x) - \cos(k_y)$. A dispersão dos elétrons p é dada por

$$\varepsilon_{\vec{k}\lambda\lambda'}^p = \begin{pmatrix} \epsilon_{\vec{k}} & -\gamma_{\vec{k}} \\ -\gamma_{\vec{k}} & \epsilon_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

e a matriz de hibridização é dada por

$$V_{\vec{k}\tau\lambda\uparrow} = \sqrt{\frac{3}{7}}(fp\sigma) \begin{pmatrix} \sqrt{5}C_{\vec{k}} & -i\sqrt{5}S_{\vec{k}} \\ C_{\vec{k}} & iS_{\vec{k}} \\ -i\sqrt{2}S_{\vec{k}} & \sqrt{2}C_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

com $C_{\vec{k}} = \cos(k_x/2)\cos(k_y/2)$ e $S_{\vec{k}} = \sin(k_x/2)\sin(k_y/2)$. Além disso, no espaço de momentos, a condição (3.10) é expressa como

$$\sum_{\vec{k},\tau,\sigma} \langle f_{\vec{k}\tau\sigma}^\dagger f_{\vec{k}\tau\sigma} \rangle = 1, \quad (3.19)$$

onde a soma em \vec{k} é feita na primeira zona de Brillouin do sistema e o valor esperado é tomado sobre todos os estados ocupados do sistema, ou seja, sobre todos os estados cuja energia é menor ou igual ao nível de Fermi. Essa condição nos permite determinar o nível de Fermi do sistema.

Resolvendo o vínculo (3.19), encontramos que o nível de Fermi que fixa em um o número de elétrons f por zona de Brillouin é $-0.53 t_p$. Em seguida, diagonalizando o Hamiltoniano (3.11) ao longo das direções de alta simetria $\Gamma X M \Gamma$ da zona de Brillouin quadrada, Fig. (3.5c), obtivemos as cinco bandas mostradas na Fig. (3.5a), sendo cada banda duplamente degenerada devido à simetria de reversão temporal do sistema. A partir dessa estrutura de bandas, notamos que as três bandas (azul, vermelha e verde da Fig.(3.5)) de mais baixa energia cruzam o nível de Fermi,

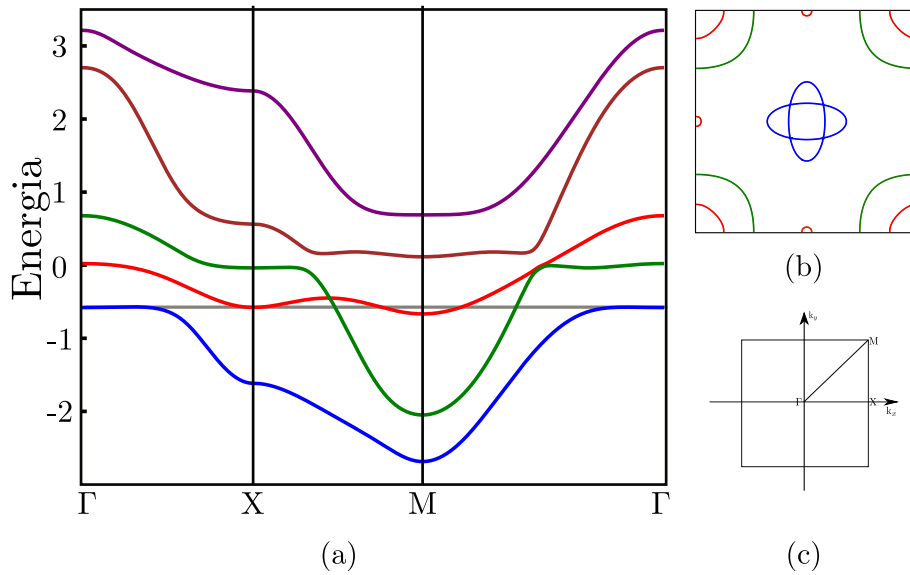


Figura 3.5: (a) Bandas de energia do sistema descrito por (3.11) e cuja energia de Fermi (linha cinza) foi determinada resolvendo (3.19) resultando em $-0.53 t_p$. (b) Superfície de Fermi descrita pelas bandas em (a). (c) Representação esquemática da zona de Brillouin quadrada.

gerando a superfície de Fermi mostrada na Fig.(3.5b).

A fim de entendermos o caráter da contribuição eletrônica das bandas que geram a superfície de Fermi, calculamos, ao longo das direções de alta simetria $\Gamma X M \Gamma$ da zona de Brillouin quadrada, o peso da contribuição dos elétrons f de cada uma das três bandas que cruzam o nível de Fermi ao longo dessas direções como mostrado na Fig.(4.6). Com base nesse cálculo, notamos que a terceira banda mais energética (banda verde) tem um caráter predominantemente do tipo f ao longo das direções de alta simetria. Em particular, como essa banda gera o *pocket* mais externo da superfície de Fermi em torno do ponto M, concluímos que a física desse *pocket* é fortemente caracterizada pelos elétrons do tipo f . A segunda banda mais energética à cruzar o nível de Fermi (banda vermelha) possui no ponto X um caráter predominantemente f , indicando que o *pocket* formado na superfície de Fermi em torno do ponto X também é caracterizado pelos elétrons f . Contudo, no ponto M, notamos que o caráter da banda é predominantemente do tipo p , indicando assim, que a física do *pocket* mais interno em torno do ponto M da superfície de Fermi é predominantemente determinada pelos elétrons do tipo p . Já a banda menos energética a curzar o nível de Fermi, responsável por gerar o *pocket* de elétrons em torno do ponto Γ na superfície de Fermi, possui um caráter predominantemente do tipo f .

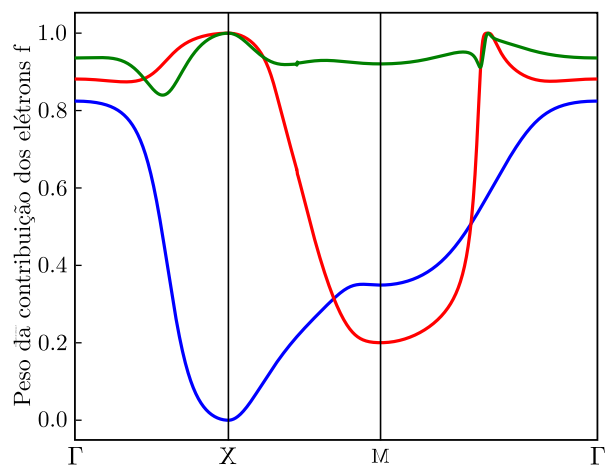


Figura 3.6: Peso da contribuição dos elétrons f das três bandas que cruzam o nível de Fermi, Fig.(3.5), ao longo das direções de alta simetria Γ XM da zona de Brillouin quadrada.

Capítulo 4

Interação no canal de carga e no canal de spin

Nesse capítulo, analisaremos dois mecanismos microscópicos, através da aproximação de campo médio, a fim de induzirmos a quebra espontânea da simetria C_4 no sistema. O primeiro mecanismo analisado é a interação Coulombiana entre os elétrons do tipo f e os elétrons do tipo p , cujo parâmetro de ordem é a hibridização entre esses dois tipos de elétrons. Contudo, veremos que essa abordagem não gera a quebra de simetria desejada. O segundo mecanismo analisado é a transição entre dois ordenamentos magnéticos do tipo SDW (do inglês, *spin density wave*) produzida pela competição entre os acoplamentos antiferromagnéticos entre momentos magnéticos primeiros e segundos vizinhos dos átomos de cério. Esse cenário apresentará a quebra espontânea de simetria C_4 desejada.

4.1 Interação Coulombiana entre os elétrons f e p

Como discutido no capítulo 1, a anisotropia na resistividade do composto $CeRhIn_5$ [8] aparece para valores de campo magnético maiores do que $B^* \approx 28T$, sendo suprimida a partir do valor crítico $B_c = 50T$, concomitantemente ao desaparecimento do ordenamento antiferromagnético do composto. Além disso, a partir do campo B^* , observa-se um aumento na superfície de Fermi (SF) do composto[2], indicando um aumento da densidade de estados na SF possivelmente originada pelo aumento da hibridização entre os elétrons f e p do sistema. Esse fato nos motiva a crer que a hibridização entre esses elétrons possa ser um possível parâmetro de ordem para a fase eletrônica em que a anisotropia da resistividade aparece.

Notamos que no modelo mínimo apresentado no capítulo anterior, os elétrons f e p se misturam devido ao termo de hibridização do sistema. Essa mistura também pode ser ocasionada ou amplificada por interações. Baseados nessa ideia, propomos um termo de interação coulombiana entre os elétrons f e p como um possível mecanismo microscópico que amplifica a hibridização entre esses elétrons e possivelmente seja capaz de quebrar a simetria C_4 do sistema em B^* . A interação coulombiana entre os elétrons f e p é dada por

$$H_{int} = \sum_{\vec{i}, n, \mu, \lambda, \sigma, \sigma'} W_{\mu\lambda} n_{\vec{i}, \mu, \sigma}^f n_{\vec{i} + \vec{b}_n, \lambda, \sigma'}^p, \quad (4.1)$$

onde $W_{\mu\lambda}$ representa a intensidade da interação coulombiana entre o elétron f no pseudo orbital μ localizado no sítio \vec{i} e o elétron p no pseudo orbital λ localizado no sítio $\vec{i} + \vec{b}$, $n_{\vec{i}, \mu, \sigma}^f$ é o operador densidade de elétrons f no pseudo orbital μ com projeção σ localizados no sítio \vec{i} e $n_{\vec{i} + \vec{b}, \lambda, \sigma'}^p$ é o operador densidade de elétrons p no pseudo orbital λ e com projeção σ' localizados no sítio $\vec{i} + \vec{b}$. Além disso, por conveniência e simplicidade, assumiremos que o ordenamento antiferromagnético do sistema é praticamente suprimido na região de campo magnético maior do que B^* e portanto, vamos desprezã-lo daqui em diante.

Em segunda quantização, o Hamiltoniano (4.1) é expresso como

$$H_{int} = \sum_{\vec{i}, \vec{b}, \mu, \lambda, \sigma, \sigma'} W_{\mu\lambda} f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \mu, \sigma} f_{\vec{i} + \vec{b}, \lambda, \sigma'}^\dagger c_{\vec{i} + \vec{b}, \lambda, \sigma'}, \quad (4.2)$$

onde $f_{\vec{i}, \mu, \sigma}$ é o operador de destruição fermiônico do elétron f no pseudo orbital μ com projeção σ localizado no sítio \vec{i} , e $c_{\vec{i} + \vec{b}, \lambda, \sigma'}^\dagger$ é o operador de destruição fermiônico do elétron p no pseudo orbital λ com projeção σ' localizado no sítio $\vec{i} + \vec{b}$. Usando as relações de anticomutação dos operadores fermiônicos

$$\{f_m^\dagger, f_n^\dagger\} = \{c_m^\dagger, c_n^\dagger\} = \{f_m, f_n\} = \{c_m, c_n\} = 0, \quad (4.3)$$

$$\{f_m, f_n^\dagger\} = \{c_m, c_n^\dagger\} = \delta_{nm}, \quad (4.4)$$

escrevemos (4.2) como

$$H_{int} = - \sum_{\vec{i}, \vec{b}, \mu, \lambda, \sigma, \sigma'} W_{\mu\lambda} f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}+\vec{b}_j, \lambda, \sigma'}^\dagger c_{\vec{i}+\vec{b}_j, \lambda, \sigma'} f_{\vec{i}, \mu, \sigma} + \sum_{\vec{i}, \vec{b}, \mu, \lambda, \sigma, \sigma'} W_{\mu\lambda} f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \mu, \sigma}. \quad (4.5)$$

Através do formalismo de campo médio, tratamos o termo de interação (4.5), reescrevendo o operador $f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}+\vec{b}_j, \lambda, \sigma'}^\dagger$ como seu valor esperado no estado fundamental do sistema acrescentado de possíveis flutuações

$$f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}+\vec{b}, \lambda, \sigma'}^\dagger = \langle f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}+\vec{b}, \lambda, \sigma'}^\dagger \rangle + \delta, \quad (4.6)$$

onde δ denota a flutuação do valor esperado no estado de equilíbrio. Supondo que o valor esperado do operador $f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}+\vec{b}, \lambda, \sigma'}^\dagger$ no estado de equilíbrio tenha o mesmo comportamento do termo de hibridização em relação à projeção do pseudo spin, escrevemos

$$\langle f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}+\vec{b}, \lambda, \sigma'}^\dagger \rangle = \phi_{\mu\lambda}^{(\vec{b})} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (4.7)$$

ou seja, o valor esperado do operador é não nulo somente em processos que preservam o sinal da projeção z do pseudo spin.

Substituindo (4.6) e (4.7) em (4.5) e desprezando os termos quadráticos na flutuação, obtemos que na aproximação de campo médio o termo de interação (4.5) é dado por

$$\begin{aligned} H_{int}^{mf} = & - \sum_{\vec{i}, \vec{b}, \mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} \left(\phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b})} c_{\vec{i}+\vec{b}, \lambda, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \mu, \sigma} + h.c \right) + \sum_{\vec{i}, \vec{b}, \mu, \lambda, \sigma, \sigma'} W_{\mu\lambda} f_{\vec{i}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \mu, \sigma} \\ & + \sum_{\vec{i}, \vec{b}, \mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} \left| \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b})} \right|^2. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Denotando os possíveis valores do vetor \vec{b} por

$$\vec{b} = \begin{cases} \vec{b}_1 = \pm \frac{1}{2} (\hat{x} + \hat{y}), \\ \vec{b}_2 = \pm \frac{1}{2} (\hat{x} - \hat{y}), \end{cases} \quad (4.9)$$

e escrevendo os operadores de criação e aniquilação fermiônicos no espaço de momento, Eqs. (3.12) e (3.13), expressamos o Hamiltoniano (4.8) no espaço recíproco como

$$\begin{aligned} H_{int}^{MF} = & -2 \sum_{\vec{k}, \mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} \left\{ \left[\phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_1)} \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_1) + \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_2)} \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_2) \right] c_{\vec{k}, \lambda, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu, \sigma} + h.c. \right\} \\ & + 8 \sum_{\vec{k}, \mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu, \sigma} + N_c \sum_{\mu, \mu', \sigma} W_{\mu\lambda} \left(\left| \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_1)} \right|^2 + \left| \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_2)} \right|^2 \right), \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde N_c denota o número de células unitárias do sistema e o vetor de onda \vec{k} pertence a zona de Brillouin quadrada.

Fisicamente, esperamos que a quebra de simetria C_4 aconteça caso haja um desbalanceamento nos canais de hibridização quando o elétron hibridizar entre os mesmos pseudo orbitais porém em direções perpendiculares entre si, isto é, se fixarmos os pseudo orbitais μ e λ , esperamos que haja uma configuração tal que $\phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_1)} \neq \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_2)}$. É importante destacar que no modelo mínimo na ausência da interação (4.1), o *valor esperado* do termo de hibridização entre os mesmos orbitais independe das direções \vec{b}_1 e \vec{b}_2 , ou seja, $\langle c_{\vec{i}+\vec{b}_1, \lambda, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \mu, \sigma} \rangle = \langle c_{\vec{i}+\vec{b}_2, \lambda, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \mu, \sigma} \rangle$. Baseados nessa motivação, introduzimos as seguintes variáveis

$$\Delta_{\mu\lambda} = \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_1)} - \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_2)}, \quad (4.11)$$

$$S_{\mu\lambda} = \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_1)} + \phi_{\mu, \lambda}^{(\vec{b}_2)}, \quad (4.12)$$

e o Hamiltoniano (4.10) é expresso como

$$\begin{aligned}
 H_{int}^{MF} = & -2 \sum_{\vec{k}, \mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} \left\{ \left[-\sin\left(\frac{k_x}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y}{2}\right) \Delta_{\mu\lambda} + \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) S_{\mu\lambda} \right] c_{\vec{k}, \lambda, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu, \sigma} + h.c. \right\} \\
 & + 8 \sum_{\vec{k}, \mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu, \sigma} + \frac{N_c}{4} \sum_{\mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} (|\Delta_{\mu\lambda}|^2 + |S_{\mu\lambda}|^2). \quad (4.13)
 \end{aligned}$$

Ao final, o Hamiltoniano total do sistema na aproximação de campo médio é dado pela adição do Hamiltoniano que representa a estrutura de bandas do sistema na ausência de interações, Eq.(3.15), e a interação (4.8), ou seja,

$$\begin{aligned}
 H_T^{mf} = & \sum_{\vec{k}, \mu, \mu', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}\mu\mu'}^f + B_{\mu\mu'}) f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu', \sigma} + \sum_{\vec{k}, \lambda, \lambda', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}\lambda\lambda'}^p + \Delta\delta_{\lambda\lambda'}) c_{\vec{k}, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \lambda', \sigma} \\
 & + \sum_{\vec{k}, \mu, \lambda, \sigma} [(V_{\vec{k}\mu\lambda} + \Omega_{\vec{k}\mu\lambda}) f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \lambda, \sigma} + h.c.] \\
 & + 8 \sum_{\vec{k}, \mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu, \sigma} + \frac{N_c}{4} \sum_{\mu, \lambda, \sigma} W_{\mu\lambda} (|\Delta_{\mu\lambda}|^2 + |S_{\mu\lambda}|^2),
 \end{aligned}$$

onde

$$\Omega_{\vec{k}\mu\lambda} = 2W_{\mu\lambda} \left[\sin\left(\frac{k_x}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y}{2}\right) \Delta_{\mu\lambda} - \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) S_{\mu\lambda} \right]. \quad (4.14)$$

Uma vez que escrevemos o Hamiltoniano na aproximação de campo médio, a energia do sistema como função dos parâmetros de campo médio é dada por

$$E(\Delta_{\mu\lambda}, S_{\mu\lambda}) = \langle H_T^{mf} \rangle. \quad (4.15)$$

Para determinarmos os valores dos parâmetros de campo médio autoconsistentemente, calculamos as equações de campo médio que são definidas a partir dos pontos críticos da energia do sistema em relação ao parâmetros de campo médio, isto é,

$$\frac{\partial E(\Delta_{\mu\lambda}, S_{\mu\lambda})}{\partial \Delta_{\mu\lambda}} = 0, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial E(\Delta_{\mu\lambda}, S_{\mu\lambda})}{\partial S_{\mu\lambda}} = 0. \quad (4.17)$$

Calculando as equações (4.16) e (4.17), obtemos que as equações de campo médio são

$$\Delta_{\mu\lambda} = -\frac{2}{N_c} \sum_{\vec{k}, \sigma} \sin\left(\frac{k_x}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y}{2}\right) \langle f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \mu', \sigma} \rangle, \quad (4.18)$$

$$S_{\mu\lambda} = \frac{2}{N_c} \sum_{\vec{k}, \sigma} \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) \langle f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \mu', \sigma} \rangle. \quad (4.19)$$

As soluções não triviais do sistema para valores não nulos da interação coulombiana, $W_{\mu\lambda} \neq 0$, são aquelas em que a diferença entre os canais de hibridização ortogonais entre si é não nula, ou seja, $\Delta_{\mu\lambda} \neq 0$. Contudo, resolvendo as equações (4.18) e (4.19), somente soluções triviais foram encontradas ($\Delta_{\mu\lambda} = 0$) para os valores de $W_{\mu\lambda}$ testados, ou seja, o mínimo de energia do sistema, nessas configurações testadas, sempre ocorre para valores nulos do parâmetro de ordem. Com isso, concluímos que a quebra da simetria C_4 não é induzida pela interação (4.1) tratada através do formalismo de campo médio, com a hibridização, Eq.(4.7), como parâmetro de ordem da transição.

Como na região de campo magnético em que a resistividade é anisotrópica ($28\text{T} < B < 50\text{T}$), o estado fundamental do composto CeRhIn_5 ainda é ordenado antiferromagneticamente, esperamos que isso tenha efeitos relevantes nos graus de liberdade de carga devido à intensa interação spin-órbita que há nesse sistema. Além disso, como já discutido anteriormente, a supressão da anisotropia na resistividade acontece concomitantemente com a supressão do ordenamento antiferromagnético do composto, indicando assim que ambas as propriedades podem estar fortemente conectadas. Portanto, como perspectiva futura, podemos analisar as soluções das equações (4.18) e (4.19) na presença de um modelo que descreva as bandas do composto CeRhIn_5 antiferromagneticamente ordenado para verificarmos se há a existência de soluções não triviais, e conseqüentemente, o aparecimento de uma ordem de carga que quebra a simetria C_4 do sistema.

4.2 Modelo de elétrons itinerantes

4.2.1 Algumas motivações experimentais

Através de dados obtidos por medidas de magnetostricção[27] no composto CeRhIn_5 na região de campo magnético $B > 28\text{T}$, P.F.S. Rosa e colaboradores corroboram a existência de uma anisotropia como reportado em [8]. Além disso, medidas de oscilações quânticas na magnetostricção realizadas pelo mesmo grupo supracitado revelam um aumento da superfície de Fermi do composto, também em $B > 28\text{T}$. Esse resultado reforça o cenário já proposto anteriormente nas Refs.[2, 28], em que os elétrons $4f$ do átomo de cério se tornam mais itinerantes e contribuem para a densidade de estados da superfície de Fermi do composto em B^* , destacando o forte papel da hibridização do sistema na física desse composto.

Além disso, P.F.S Rosa e colaboradores discutem a dependência da hibridização do sistema com a função de onda do estado fundamental dos elétrons $4f$ do átomo de cério, cuja determinação possui forte dependência com o campo cristalino da estrutura tetragonal do composto. Em particular, eles argumentam que um ingrediente fundamental para o entendimento do problema é a dependência das funções de onda desses elétrons determinadas pelo campo cristalino com o campo magnético externo que poderiam explicar o aumento na hibridização entre os elétrons f e p .

Reforçando essa ideia, R.R. Urbano e colaboradores[29] propõem um cenário semelhante ao reportado por P.F.S. Rosa[27], baseados em alterações nas linhas do espectro de medidas de NMR (do inglês, *nuclear magnetic resonance*), na presença de um campo magnético externo na direção do eixo c do cristal, tanto do átomo de índio no mesmo plano dos átomos de cério e denotado por In(1), quanto nas linhas do átomo de índio fora do plano, denotado por In(2). Para explicar tal alteração, eles propõem uma mudança no estado fundamental de campo cristalino do sistema como função do campo magnético. A fim de analisar essa hipótese, R.R. Urbano e colaboradores analisam os níveis de energia e a ocupação do estado fundamental de campo cristalino da estrutura tetragonal para um único íon na presença de um campo magnético externo (termo Zeeman) na direção c do cristal, considerando o multipletto fundamental do composto, que pela regra de Hund, corresponde a $j = 5/2$.

O Hamiltoniano que descreve o cenário proposto por R.R. Urbano e colaboradores é dado por

$$H = H_{CEF} - g_j \mu_B B J_z, \quad (4.20)$$

onde H_{CEF} representa o Hamiltoniano de campo cristalino cujos elementos são dados por (3.9).

Além disso, μ_B é o magneton de Bohr, B é o módulo do campo magnético externo, J_z é a projeção do momento angular total na direção z e g_j é o fator giromagnético que, no caso de $j = 5/2$, corresponde a $6/7$. No regime de interesse, isto é, para $B > B^*$, o termo Zeeman não pode ser tratado perturbativamente, já que seu valor é da ordem dos termos de campo cristalino da estrutura. Na fig.(4.1a), observamos que há um entortamento dos níveis de energia nesse regime de campo magnético e não somente uma separação dos níveis como no caso perturbativo. Além disso, o estado fundamental do sistema para valores de campo não nulos é sempre dado pela combinação

$$|\Psi_0(B)\rangle = \alpha(B)|+5/2\rangle - \beta(B)|-3/2\rangle, \quad (4.21)$$

onde $\alpha(B)$ e $\beta(B)$ são coeficientes determinados através da diagonalização exata do Hamiltoniano (4.20) para cada valor de B . Contudo, na ausência de campo magnético externo, o estado fundamental do sistema é duplamente degenerado e é expresso como

$$|\Psi_0\rangle = \alpha|\pm 5/2\rangle - \beta|\mp 3/2\rangle. \quad (4.22)$$

Na figura (4.1b), observamos que o estado fundamental do sistema (nível de energia em azul na fig.(4.1a)) é predominantemente dominado pela contribuição do orbital cuja projeção do momento angular total na direção z é $5/2$. O orbital puramente $|5/2\rangle$ possui o formato de um *donut*, implicando assim que o orbital dos elétrons $4f$ seja mais oblato e portanto, mais confinado no plano ab do cristal. Com base nisso, a função de onda do estado fundamental dos elétrons $4f$ induzida pelo campo magnético externo se torna mais confinada no plano basal do composto e seu formato aponta para o aumento da hibridização entre esses elétrons e os elétrons $5p$ dos átomos de índio no centro do plano.

Contudo, para que haja o aumento na hibridização entre os elétrons $4f$ dos átomos de cério e os elétrons $5p$ dos átomos de índio, é necessário que o alongamento da função de onda do estado fundamental de campo cristalino com o aumento do campo magnético aconteça ao longo da direção do átomo de índio localizado na posição cristalográfica $[110]$. Na Ref.[30], A. Severing e colaboradores, através de medidas de espalhamento inelástico de raios x não ressonantes (NIXS), analisam a orientação do estado fundamental de campo cristalino (Γ_7) numa célula unitária dos compostos CeRhIn_5 e CeCoIn_5 na ausência de campo magnético. Eles concluem que a função de onda do dubleto fundamental é representada pelo estado

$$|\Gamma_7^-\rangle = |\alpha|^2 |\pm 5/2\rangle - \sqrt{1 - \alpha^2} |\mp 3/2\rangle. \quad (4.23)$$

Através do sinal do coeficiente da contribuição do orbital $|\mp 3/2\rangle$, eles extraem que a orientação da função de onda do estado fundamental se dá ao longo do eixo $[110]$ tanto para o CeRhIn_5 quanto para o CeCoIn_5 , como mostrado esquematicamente na fig.(4.2). Dessa forma, os resultados de A. Severing e colaboradores reforçam o cenário onde há um aumento na hibridização entre os elétrons $4f$ dos átomos de cério e os elétrons $5p$ dos átomos de índio no centro do plano basal da estrutura tetragonal do composto.

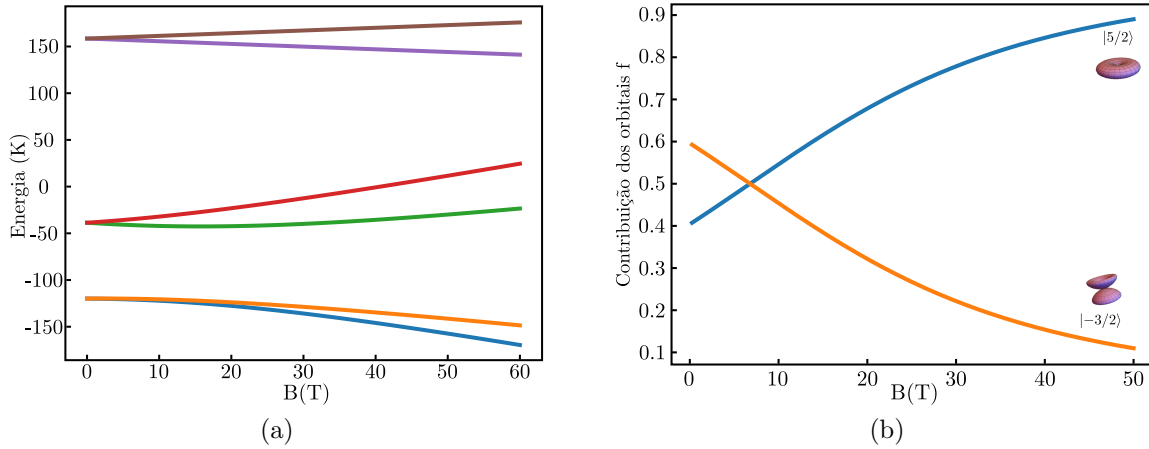


Figura 4.1: (a) Níveis de energia e ocupação do estado fundamental de campo cristalino da estrutura tetragonal para um único íon na presença de um campo magnético externo na direção z . (b) Peso da contribuição dos orbitais no estado fundamental de campo cristalino.

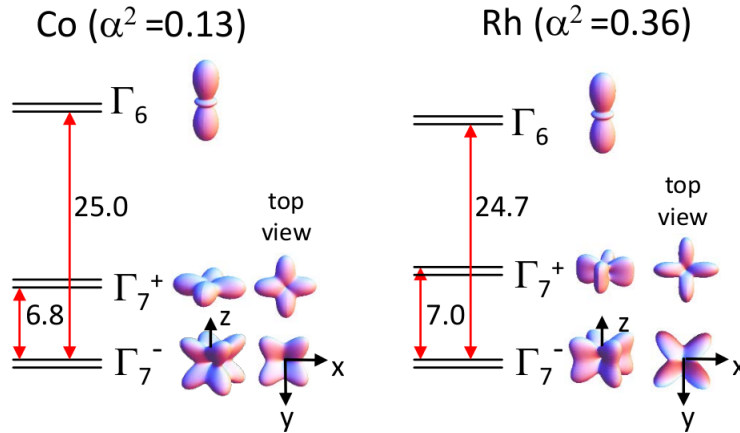


Figura 4.2: Separação dos níveis de campo cristalino do multiplete $j = 5/2$ dos compostos CeCoIn_5 e CeRhIn_5 . O sinal da função de onda dos estados já foi considerado ao plotar as densidades de carga dos elétrons f^1 . Convencionalmente, $|\Gamma_7^\pm\rangle = |\alpha|^2 |\pm 5/2\rangle \pm \sqrt{1 - \alpha^2} |\mp 3/2\rangle$ e $|\Gamma_6\rangle = |\mp 1/2\rangle$. Figura retirada da Ref.[30]

4.2.2 Densidade eletrônica do modelo na presença de um campo magnético externo

A fim de analisarmos a contribuição dos estados eletrônicos ocupados pelos elétrons f na estrutura de bandas descrita pelo Hamiltoniano (3.15) como função do campo magnético externo, calculamos a densidade de elétrons f para cada valor de pseudo spin μ e projeção σ na direção z ,

ou seja,

$$n_{\mu,\sigma}^f = \sum_{\vec{k}} \langle f_{\vec{k},\mu,\sigma}^\dagger f_{\vec{k},\mu,\sigma} \rangle, \quad (4.24)$$

onde \vec{k} pertence a zona de Brillouin quadrada.

Para compararmos o resultado com o cenário proposto por R.R. Urbano[29], fig.(4.1b), separamos as densidades eletrônicas dos orbitais $|5/2\rangle$ e $|-3/2\rangle$, fig.(4.3a), das demais contribuições, fig.(4.3b). Além disso, a fim de mantermos a ocupação unitária dos estados ocupados pelos elétrons f , Eq.(3.10), para cada valor de campo magnético, determinamos a energia de Fermi do sistema, fig.(4.3c). A fig.(4.3a) nos mostra que no modelo descrito por (3.15), a densidade eletrônica dos elétrons f é dominada pela contribuição do orbital $|5/2\rangle$ para valores de campo magnético da ordem de 8T, diferentemente do observado na fig.(4.1b), em que essa dominância se dá para valores de campo da ordem de 30 T . Essa diferença pode ser originada devido à ausência de correlações eletrônicas no modelo que descreve as bandas eletrônicas, Eq.(3.15). Contudo, o mesmo comportamento qualitativo é reproduzido, sugerindo que há um aumento na hibridização entre os orbitais dos elétrons $4f$ dos átomos de cério e os elétrons $5p$ dos átomos de índio localizados no plano basal da estrutura tetragonal do composto.

Como discutido no capítulo 1, o estado fundamental do composto CeRhIn_5 , na ausência de campo magnético, apresenta um ordenamento antiferromagnético incomensurado em três dimensões[5, 6], cujo vetor de ordenamento magnético é dado por $\vec{Q} = 2\pi(0.5, 0.5, 0.297)$. Contudo, como o sistema pode ser tratado como quasi-bidimensional (discussão da seção 2.1), por conveniência, no nosso modelo consideraremos que no plano basal da estrutura tetragonal do composto, os momentos magnéticos dos átomos de cério primeiros vizinhos estão ordenados antiferromagneticamente na fase de Néel (fase comensurada), cujo vetor de ordenamento magnético é dado por $\vec{Q}_N = 2\pi(0.5, 0.5)$.

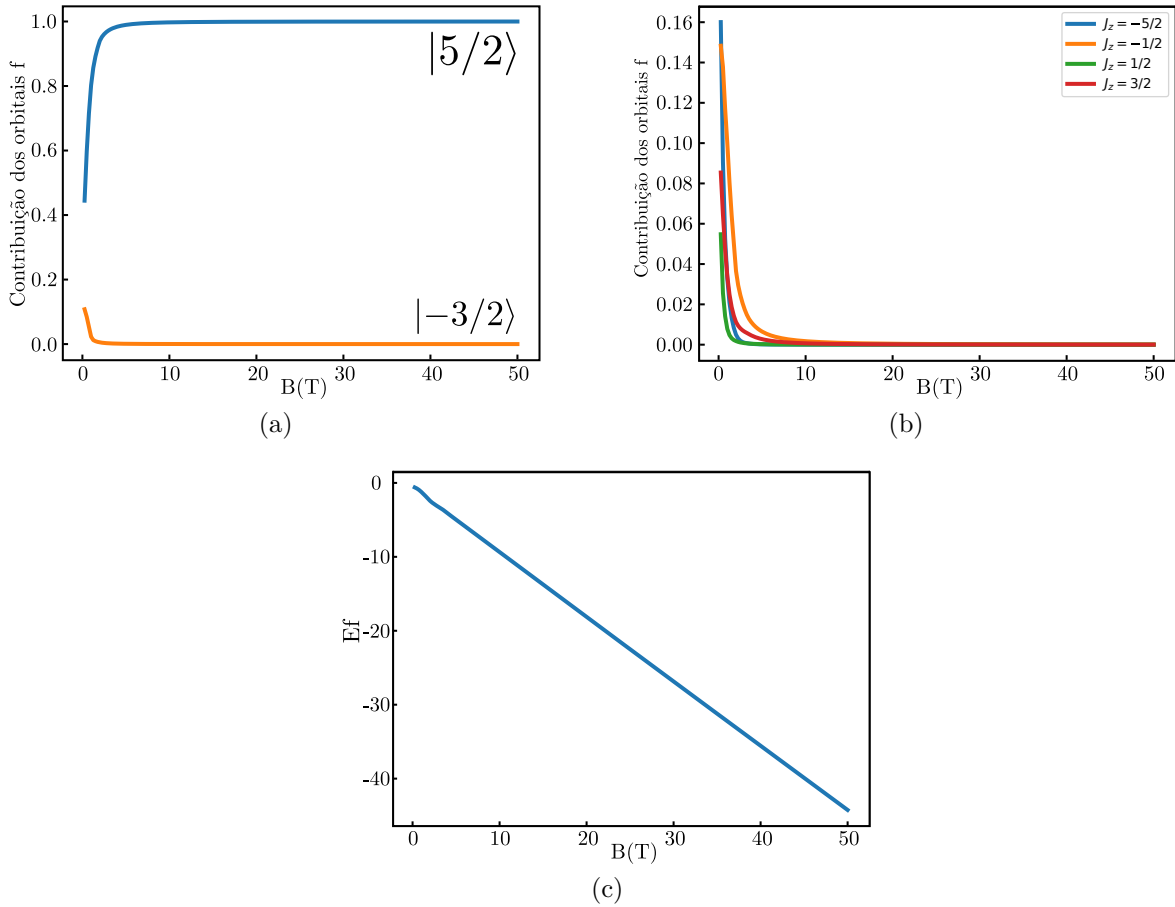


Figura 4.3: (a) Contribuição dos orbitais $|5/2\rangle$ e $|3/2\rangle$ dos elétrons f no estado fundamental como função do campo magnético externo. (b) Contribuição dos orbitais $|-5/2\rangle$, $|-3/2\rangle$, $|1/2\rangle$ e $|-1/2\rangle$ dos elétrons f no estado fundamental como função do campo magnético externo. (c) Nível de Fermi do sistema como função do campo magnético externo.

À medida que aumentamos a intensidade do campo magnético aplicado no composto, a hibridização entre os elétrons $4f$ dos átomos de cério e os elétrons $5p$ dos átomos de índio aumenta. Consequentemente, a interação de troca entre os átomos de cério segundos vizinhos deve se tornar mais relevante, já que a constante de troca depende quadraticamente da hibridização[31], ou seja,

$$\mathcal{J} \propto V^2, \quad (4.25)$$

onde \mathcal{J} denota a constante de troca e V denota a hibridização. Com o aumento da interação de troca antiferromagnética entre os momentos magnéticos segundos vizinhos (\mathcal{J}_1) em relação à

interação entre os momentos magnéticos primeiros vizinhos (\mathcal{J}_0), esperamos observar um cenário de frustração magnética devido a competição entre essas interações de troca antiferromagnéticas. No limite em que $\mathcal{J}_1 \ll \mathcal{J}_0$, esperamos que os pares de ligação entre momentos magnéticos primeiros vizinhos sejam satisfeitos, caracterizando o chamado estado de Néel (ilustrado na Fig.(4.4a)), o qual possui a simetria C_4 . Contudo, no limite em que $\mathcal{J}_1 \gg \mathcal{J}_0$, esperamos os pares de ligação entre momentos magnéticos segundos vizinhos sejam satisfeitos, favorecendo que o sistema se ordene antiferromagneticamente ao longo das diagonais do plano, caracterizando o chamado estado C-AFM (ilustrado na Fig.(4.4b)) no qual a simetria C_4 é quebrada. Portanto, esperamos observar um cenário em que a quebra de simetria C_4 dos estados eletrônicos seja originada na frustração magnética devido à competição das interações de troca antiferromagnéticas entre os momentos magnéticos primeiros e segundos vizinhos dos átomos de cério.

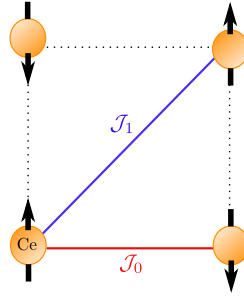


Figura 4.4: (a) Representação esquemática do ordenamento de Néel para a rede quadrada. (b) Representação esquemática para o ordenamento C-AFM para a rede quadrada.

4.2.3 Modelo $\mathcal{J}_0 - \mathcal{J}_1$ para elétrons itinerantes

Para descrevermos o cenário de frustração magnética discutido na subseção anterior, primeiramente consideraremos que os graus de liberdade de carga estão congelados e partiremos do modelo de Heisenberg considerando a interação de troca entre momentos magnéticos primeiros e segundos vizinhos acoplados antiferromagneticamente, fig.(4.5), descrito por

$$H_{\mathcal{J}_0-\mathcal{J}_1} = \mathcal{J}_0 \sum_{\langle ij \rangle} \vec{J}_i^f \cdot \vec{J}_j^f + \mathcal{J}_1 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \vec{J}_i^f \cdot \vec{J}_j^f, \quad (4.26)$$


 Figura 4.5: Representação esquemática do modelo $J_0 - J_1$.

onde \mathcal{J}_0 e \mathcal{J}_1 denotam a magnitude da interação de troca antiferromagnética entre momentos magnéticos primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, e \vec{J}_i^f representa o operador de momento angular total ($j = 5/2$) do elétron $4f$ do átomo de cério localizado no sítio i . Através do formalismo de campo médio, expressamos o operador de momento angular total do elétron f como seu valor esperado no estado fundamental do sistema acrescentado de possíveis flutuações

$$\vec{J}_j^f = \langle \vec{J}_j^f \rangle + \delta_j, \quad (4.27)$$

onde δ_j denota a flutuação do valor esperado do operador de momento angular total no estado de equilíbrio no sítio j .

Substituindo (4.27) em (4.26) e desprezando os termos quadráticos na flutuação, na aproximação de campo médio, obtemos

$$\begin{aligned} H_{J_0-J_1}^{mf} &= \mathcal{J}_0 \sum_{\langle ij \rangle} \left[2 \langle \vec{J}_i^f \rangle \cdot \vec{J}_j^f - \langle \vec{J}_i^f \rangle \cdot \langle \vec{J}_j^f \rangle \right] \\ &+ \mathcal{J}_1 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \left[2 \langle \vec{J}_i^f \rangle \cdot \vec{J}_j^f - \langle \vec{J}_i^f \rangle \cdot \langle \vec{J}_j^f \rangle \right] \\ &= \mathcal{J}_0 \sum_{j,n,\vec{b}_n^{(nn)}} \left[2 \langle \vec{J}_{j+\vec{\delta}_n}^f \rangle \cdot \vec{J}_j^f - \langle \vec{J}_{j+\vec{\delta}_n}^f \rangle \cdot \langle \vec{J}_j^f \rangle \right] \\ &+ \mathcal{J}_1 \sum_{j,n,\vec{b}_n^{(nnn)}} \left[2 \langle \vec{J}_{j+\vec{b}_n^{(nnn)}}^f \rangle \cdot \vec{J}_j^f - \langle \vec{J}_{j+\vec{b}_n^{(nnn)}}^f \rangle \cdot \langle \vec{J}_j^f \rangle \right], \end{aligned} \quad (4.28)$$

onde $\vec{\delta}_n$ denota o vetor posição entre momentos magnéticos primeiros vizinhos dado por

$$\vec{\delta}_n = \begin{cases} \vec{\delta}_1 = \hat{x}, \\ \vec{\delta}_2 = \hat{y}, \end{cases} \quad (4.29)$$

e $\vec{b}_n^{(nnn)}$ denota o vetor posição entre momentos magnéticos segundos vizinhos definido por

$$\vec{b}_n^{(nnn)} = \begin{cases} \vec{b}_1^{(nnn)} = \hat{x} + \hat{y} \\ \vec{b}_2^{(nnn)} = \hat{y} - \hat{x} \end{cases}. \quad (4.30)$$

Por fim, assumindo que o valor esperado do operador de momento angular total localizado no sítio j pode ser escrito de maneira genérica como um o produto de um vetor constante \vec{M} e um padrão espacial determinado pelo vetor de ordenamento magnético \vec{Q} , ou seja,

$$\langle \vec{J}_j^f \rangle \equiv \vec{M} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_j} \quad (4.31)$$

onde \vec{R}_j é o vetor posição do sítio j , obtemos que (4.28) é escrito como

$$\begin{aligned} H_{J_0-J_1}^{mf} &= 2 \sum_j \sum_n \left(\mathcal{J}_0 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{\delta}_n} + \mathcal{J}_1 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{b}_n^{(nnn)}} \right) e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_j} \vec{M} \cdot \vec{J}_j^f \\ &\quad - |\vec{M}|^2 \sum_j \sum_n \left(\mathcal{J}_0 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{\delta}_n} + \mathcal{J}_1 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{b}_n^{(nnn)}} \right) e^{i2\vec{Q} \cdot \vec{R}_j}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Como queremos estudar algumas fases magnéticas geradas através da frustração magnética entre momentos magnéticos primeiros e segundos vizinhos acoplados antiferromagneticamente num sistema de férmions itinerantes, assumiremos a abordagem de onda de densidade de spin (SDW) que é um tipo de fase ordenada para esse tipo de sistema onde a densidade de spin exhibe oscilações espaciais com vetor de onda \vec{Q} [32]. Em segunda quantização, a densidade de spin é escrita como

$$\vec{J}_j = \sum_{\alpha\beta} f_{j,\alpha}^\dagger \vec{J}_{\alpha\beta} f_{j,\beta}, \quad (4.33)$$

onde $f_{j,\alpha}^\dagger$ denota o operador de criação fermiônico com número quântico α localizado no sítio j e $\vec{J}_{\alpha\beta} \equiv (J_{\alpha\beta}^x, J_{\alpha\beta}^y, J_{\alpha\beta}^z)$ denota o vetor cujas componentes são as matrizes do momento angular total correspondente. Substituindo (4.33) em (4.32) obtemos

$$\begin{aligned} H_{J_0-J_1}^{mf} &= 2 \sum_{j\alpha\beta} \sum_n \left(\mathcal{J}_0 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{\delta}_n} + \mathcal{J}_1 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{b}_n^{(nnn)}} \right) e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}_j} f_{j,\alpha}^\dagger \left(\vec{M} \cdot \vec{J}_{\alpha\beta} \right) f_{j,\beta} \\ &\quad - |\vec{M}|^2 \sum_j \sum_n \left(\mathcal{J}_0 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{\delta}_n} + \mathcal{J}_1 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{b}_n^{(nnn)}} \right) e^{i2\vec{Q}\cdot\vec{R}_j}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Escrevendo a transformada de Fourier dos operadores de criação e aniquilação fermiônicos, Eqs.(3.12) e (3.13), na aproximação de campo médio, o Hamiltoniano de interação (4.34) no espaço de momentos é dado por

$$\begin{aligned} H_{J_0-J_1}^{mf} &= 2 \sum_{\vec{k}\alpha\beta} \sum_n \left(\mathcal{J}_0 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{\delta}_n} + \mathcal{J}_1 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{b}_n^{(nnn)}} \right) f_{\vec{k}+\vec{Q},\alpha}^\dagger \left(\vec{M} \cdot \vec{J}_{\alpha\beta} \right) f_{\vec{k},\beta} \\ &\quad - |\vec{M}|^2 \sum_j \sum_n \left(\mathcal{J}_0 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{\delta}_n} + \mathcal{J}_1 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{b}_n^{(nnn)}} \right) e^{i2\vec{Q}\cdot\vec{R}_j}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Como essa formulação é bem definida para fases magnéticas comensuradas, o vetor de onda \vec{k} pertence a zona de Brillouin magnética que é determinada pelo vetor de ordenamento magnético \vec{Q} da fase magnética de interesse.

No espaço de momentos, a interação (4.35) acopla os estados eletrônicos com vetor de onda \vec{k} aos estados eletrônicos com vetor de onda $\vec{k} + \vec{Q}$. Dado que conhecemos o Hamiltoniano que descreve os estados eletrônicos com momento \vec{k} na ausência da interação, Eq.(3.15), para estudarmos o ordenamento magnético induzido por essa interação, devemos agora considerar o Hamiltoniano que descreve os estados eletrônicos com momento $\vec{k} + \vec{Q}$ que é obtido a partir da Eq.(3.5) ao trocarmos \vec{k} por $\vec{k} + \vec{Q}$. Com isso, o Hamiltoniano do sistema na aproximação de campo médio para fases magnéticas comensuradas do tipo SDW considerando o acoplamento antiferromagnético no plano entre os momentos magnéticos primeiros e segundos vizinhos é dado por

$$\begin{aligned}
 H_T^{mf} = & \sum_{\vec{k}, \mu, \mu', \sigma} \left(\varepsilon_{\vec{k}\mu\mu'}^f + B_{\mu\mu'} \right) f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu', \sigma} + \sum_{\vec{k}, \lambda, \lambda', \sigma} \left(\varepsilon_{\vec{k}\lambda\lambda'}^p + \Delta\delta_{\lambda\lambda'} \right) c_{\vec{k}, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \lambda', \sigma} \\
 & + \sum_{\vec{k}, \mu, \lambda, \sigma} \left[V_{\vec{k}\mu\lambda} f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \lambda, \sigma} + h.c \right] + \sum_{\vec{k}, \mu, \mu', \sigma} \left(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}\mu\mu'}^f + B_{\mu\mu'} \right) f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu', \sigma} \\
 & + \sum_{\vec{k}, \lambda, \lambda', \sigma} \left(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}\lambda\lambda'}^p + \Delta\delta_{\lambda\lambda'} \right) c_{\vec{k}+\vec{Q}, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{Q}, \lambda', \sigma} + \sum_{\vec{k}, \mu, \lambda, \sigma} \left[V_{\vec{k}+\vec{Q}\mu\lambda} f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{Q}, \lambda, \sigma} + h.c \right] \\
 & + 2 \sum_{\vec{k}\mu\mu'} \mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}) f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger (\vec{M} \cdot \vec{J}_{\mu\mu'}) f_{\vec{k}, \mu'} - \mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}) |\vec{M}|^2 \sum_j e^{i2\vec{Q} \cdot \vec{R}_j}, \tag{4.36}
 \end{aligned}$$

onde

$$\mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}) = \sum_n \left(\mathcal{J}_0 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{\delta}_n} + \mathcal{J}_1 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{b}_n^{(nnn)}} \right). \tag{4.37}$$

Fixado o vetor de ordenamento magnético \vec{Q} da fase comensurada de interesse, escrevemos, de maneira genérica, a direção do momento magnético em coordenadas esféricas

$$\vec{M} = M (\sin \theta \cos \varphi \hat{x} + \sin \theta \sin \varphi \hat{y} + \cos \theta \hat{z}), \tag{4.38}$$

onde M é o módulo da magnetização, θ e φ são os ângulos polar e azimutal, respectivamente. Escrevendo o Hamiltoniano (4.36) como função de M , θ e φ , temos que a energia média do sistema é dada por

$$E(M, \theta, \phi) = \langle H_T^{mf} \rangle, \tag{4.39}$$

e os valores dos parâmetros de campo médio são determinados autoconsistentemente através das equações de campo médio definidas por

$$\frac{\partial E(M, \theta, \varphi)}{\partial M} = 0, \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial E(M, \theta, \varphi)}{\partial \theta} = 0, \quad (4.41)$$

$$\frac{\partial E(M, \theta, \varphi)}{\partial \varphi} = 0. \quad (4.42)$$

Calculando (4.40), (4.41) e (4.42), chegamos que as equações de campo médio para esse sistema são

$$M = \sum_{\vec{k}} \sum_{\mu, \mu'} \left[\langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \theta \cos \varphi + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \theta \sin \varphi + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^z f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \cos \theta \right], \quad (4.43)$$

$$\theta = \tan^{-1} \left[\frac{\sum_{\vec{k}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \cos \varphi + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \varphi}{\sum_{\vec{k}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^z f_{\vec{k}, \mu'} \rangle} \right], \quad (4.44)$$

$$\varphi = \tan^{-1} \left[\frac{\sum_{\vec{k}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle}{\sum_{\vec{k}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle} \right], \quad (4.45)$$

onde o vetor de onda \vec{k} pertence a zona de Brillouin magnética determinada pelo vetor de ordenamento magnético \vec{Q} .

Na presença de um campo cristalino originado pela presença dos outros íons da rede, nem todas as direções para a quebra de simetria são equiprováveis, diferentemente do que ocorre no modelo de Heisenberg para momentos magnéticos na ausência desse campo. Isso se deve ao fato de que efetivamente, o campo cristalino respeita as simetrias do grupo pontual de cada estrutura cristalina, estabelecendo assim certas regras de seleção para as direções em que essa quebra de simetria de rotação pode ocorrer, e conseqüentemente, para a direção do momento magnético. No caso da estrutura tetragonal, há sempre dois eixos equivalentes entre si (por exemplo, os eixos x e y) e um terceiro eixo inequivalente a esses dois (por exemplo, o eixo z). Num sistema bidimensional, devido à equivalência dos eixos no plano basal da estrutura sob rotações de 90° em torno do eixo z (simetria C_4), ao determinarmos uma solução no plano, devemos sempre encontrar uma solução equivalente (com mesma energia) rotacionada de 90° em torno do eixo z . Essa simetria se refletirá nas possíveis soluções das equações, Eqs.(4.44) e (4.45), que determinam os ângulos

polar e azimutal do vetor de momento magnético.

Uma vez que estabelecemos a formulação de campo médio para fases magnéticas comensuradas do tipo SDW, nas próximas duas seções discutiremos as soluções encontradas para o chamado ordenamento de Néel e para o chamado ordenamento C-AFM.

4.2.4 Fase de Néel

Como discutido na seção 1.2.2, no regime em que $\mathcal{J}_1 \ll \mathcal{J}_0$, espera-se que os pares de interação entre momentos magnéticos primeiros vizinhos são satisfeitos, de modo que esses momentos magnéticos se alinhem antiparalelamente, como ilustrado na Fig.(4.4a). Esse comportamento caracteriza o chamado estado de Néel cujo vetor de ordenamento magnético é dado por

$$\vec{Q}_N = (\pi, \pi). \quad (4.46)$$

Consequentemente, o valor esperado do operador de momento angular total no sítio j , Eq.(4.31), é dado por

$$\langle \vec{J}_j^f \rangle = \vec{m}_n e^{i\vec{Q}_N \cdot \vec{R}_j}, \quad (4.47)$$

onde \vec{m}_n denota o vetor de magnetização e \vec{R}_j denota a posição do sítio j . Substituindo (4.46) e (4.47) nas equações (4.36) e (4.37) obtemos que o Hamiltoniano do sistema é escrito como

$$\begin{aligned} H_T^{mf} = & \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \left\{ \sum_{\mu, \mu', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}\mu\mu'}^f + B_{\mu\mu'}) f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu', \sigma} + \sum_{\lambda, \lambda', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}\lambda\lambda'}^p + \Delta\delta_{\lambda\lambda'}) c_{\vec{k}, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \lambda', \sigma} \right\} \\ & + \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \left\{ \sum_{\mu, \lambda, \sigma} [V_{\vec{k}\mu\lambda} f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \lambda, \sigma} + h.c.] + \sum_{\mu, \mu', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}_N\mu\mu'}^f + B_{\mu\mu'}) f_{\vec{k}+\vec{Q}_N, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}+\vec{Q}_N, \mu', \sigma} \right\} \\ & + \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \left\{ \sum_{\lambda, \lambda', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}_N\lambda\lambda'}^p + \Delta\delta_{\lambda\lambda'}) c_{\vec{k}+\vec{Q}_N, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{Q}_N, \lambda', \sigma} + \sum_{\mu, \lambda, \sigma} [V_{\vec{k}+\vec{Q}_N\mu\lambda} f_{\vec{k}+\vec{Q}_N, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{Q}_N, \lambda, \sigma} + h.c.] \right\} \\ & + \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} 2\mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}_N) f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger (\vec{m}_N \cdot \vec{J}_{\mu\mu'}) f_{\vec{k}, \mu'} - \mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}_N) |\vec{m}_N|^2, \quad (4.48) \end{aligned}$$

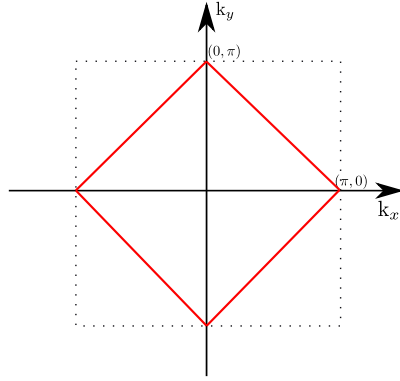


Figura 4.6: Representação esquemática da zona de Brillouin magnética para a fase de Néel (em vermelho) cujo vetor de ordenamento magnético é dado por $\vec{Q}_N = (\pi, \pi)$, em comparação com a zona de Brillouin quadrada na ausência de ordenamento (tracejado em preto).

onde a expressão para as matrizes das dispersões $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}_N}^f$, $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}_N}^p$ e $V_{\vec{k}+\vec{Q}_N}$ se encontram no Apêndice 3, e o vetor de onda \vec{k} pertence à zona de Brillouin reduzida para o ordenamento de Néel ilustrada na Fig.(4.6). Além disso, a constante de troca efetiva é dada por

$$\mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}_N) = 2(\mathcal{J}_0 - \mathcal{J}_1). \quad (4.49)$$

A partir da Eq.(4.49), esperamos que com o aumento da intensidade do acoplamento \mathcal{J}_1 , mantendo \mathcal{J}_0 fixo, o acoplamento (4.49) seja reduzido, implicando no enfraquecimento do ordenamento magnético da fase de Néel. Além disso, a partir do valor $\mathcal{J}_1^* = \mathcal{J}_0$, ocorre a mudança do sinal do acoplamento (4.49), invalidando a escolha do ansatz (4.47). Por fim, substituindo (4.46) e (4.47) nas equações (4.43), (4.44) e (4.45), obtemos que as equações de campo médio para esse ordenamento são dadas por

$$m_N = \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \left[\langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \theta_N \cos \varphi_N + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \theta_N \sin \varphi_N + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^z f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \cos \theta_N \right], \quad (4.50)$$

$$\theta_N = \tan^{-1} \left[\frac{\sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \cos \varphi_N + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \varphi_N}{\sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^z f_{\vec{k}, \mu'} \rangle} \right], \quad (4.51)$$

$$\varphi_N = \tan^{-1} \left[\frac{\sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle}{\sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle} \right]. \quad (4.52)$$

Resolvendo as equações (4.50), (4.51) e (4.52) autoconsistentemente com $\mathcal{J}_0 = 0.6$ e variando \mathcal{J}_1 , obtemos os resultados ilustrados na Fig.(4.7). Na Fig.(4.7a) vemos que como esperado, à medida que \mathcal{J}_1 aumenta e, conseqüentemente, \mathcal{J}_{ef} é reduzido, o módulo da magnetização descrita por (4.47) decresce, indicando o enfraquecimento do ordenamento de Néel. Quanto à orientação espacial do vetor de magnetização, a Fig.(4.7b) nos mostra que o vetor se encontra no plano basal da estrutura do composto e, em particular, apontando na direção x como mostrado na Fig.(4.7c). Além disso, a energia de Fermi do sistema foi determinada simultaneamente para cada solução autoconsistente, de modo a manter a ocupação unitária dos elétrons f , como mostrado na Fig.(4.7d).

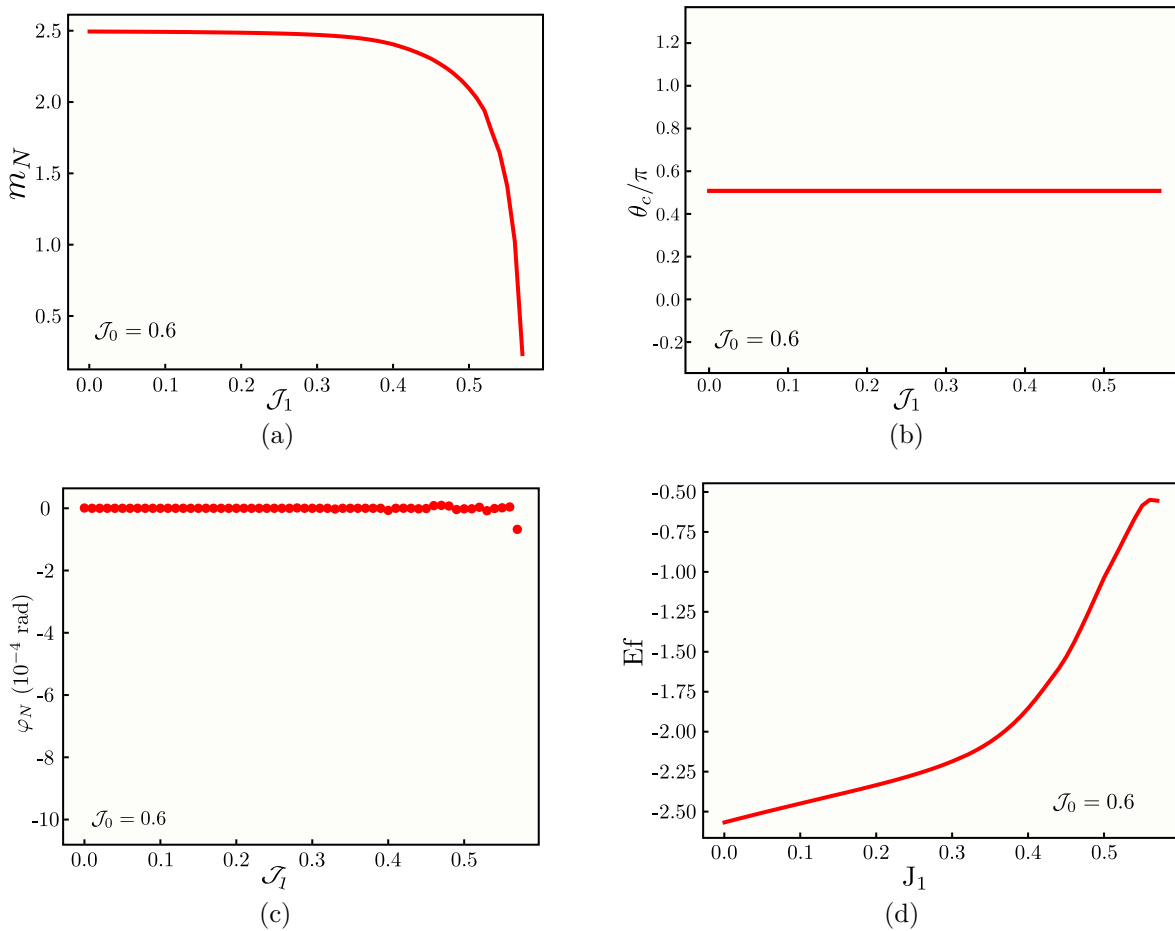


Figura 4.7: Solução autoconsistente das equações de campo médio (4.50), (4.51) e (4.52) para a fase de Néel como função da interação de troca entre momentos magnéticos segundos vizinhos (\mathcal{J}_1): (a) Magnetização. (b) Ângulo polar. (c) Ângulo zimutal. (d) Energia de Fermi.

4.2.5 Fase C-AFM

No regime em que $\mathcal{J}_1 \gg \mathcal{J}_0$, espera-se que os pares de interação entre momentos magnéticos segundos vizinhos sejam satisfeitos, de modo que esses momentos magnéticos se alinham antiparalelamente nas diagonais do plano, como ilustrado na Fig.(4.4b). Esse comportamento caracteriza o chamado estado C-AFM cujo vetor de ordenamento magnético é dado por

$$\vec{Q}_c = (\pi, 0) \text{ ou } (0, \pi), \quad (4.53)$$

já que ambos são equivalentes por simetria. Consequentemente, o valor esperado do operador de momento angular total no sítio j , Eq.(4.31), é dado por

$$\langle \vec{J}_j^f \rangle = \vec{m}_c e^{i\vec{Q}_c \cdot \vec{R}_j}, \quad (4.54)$$

onde \vec{m}_c denota o vetor de magnetização e \vec{R}_j denota a posição do sítio j . Substituindo (4.53) e (4.54) nas equações (4.36) e (4.37) obtemos que o Hamiltoniano do sistema é escrito como

$$\begin{aligned} H_T^{mf} = & \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \left\{ \sum_{\mu, \mu', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}\mu\mu'}^f + B_{\mu\mu'}) f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \mu', \sigma} + \sum_{\lambda, \lambda', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}\lambda\lambda'}^p + \Delta\delta_{\lambda\lambda'}) c_{\vec{k}, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \lambda', \sigma} \right\} \\ & + \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \left\{ \sum_{\mu, \lambda, \sigma} [V_{\vec{k}\mu\lambda} f_{\vec{k}, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \lambda, \sigma} + h.c.] + \sum_{\mu, \mu', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}_c\mu\mu'}^f + B_{\mu\mu'}) f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu', \sigma} \right\} \\ & + \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \left\{ \sum_{\lambda, \lambda', \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}_c\lambda\lambda'}^p + \Delta\delta_{\lambda\lambda'}) c_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \lambda, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \lambda', \sigma} + \sum_{\mu, \lambda, \sigma} [V_{\vec{k}+\vec{Q}_c\mu\lambda} f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \lambda, \sigma} + h.c.] \right\} \\ & + \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} 2\mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}_c) f_{\vec{k}+\vec{Q}_c}^\dagger (\vec{m}_c \cdot \vec{J}_{\mu\mu'}) f_{\vec{k}, \mu'} - \mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}_c) |\vec{m}_c|^2, \end{aligned} \quad (4.55)$$

onde a expressão para as matrizes das dispersões $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}_c}^f$, $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}_c}^p$ e $V_{\vec{k}+\vec{Q}_c}$ se encontram no Apêndice B, e o vetor de onda \vec{k} pertence à zona de Brillouin reduzida para o ordenamento C-AFM ilustrada na Fig.(4.6). Além disso, a constante de troca efetiva é dada por

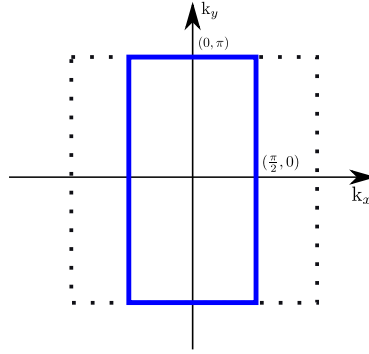


Figura 4.8: Representação esquemática da zona de Brillouin magnética para a fase C-AFM (em azul) cujo vetor de ordenamento magnético é dado por $\vec{Q}_N = (\pi, 0)$, em comparação com a zona de Brillouin quadrada na ausência de ordenamento (tracejado em preto).

$$\mathcal{J}_{ef}(\vec{Q}_c) = 2\mathcal{J}_1. \quad (4.56)$$

A Eq.(4.56) nos mostra que a constante de troca efetiva para esse ordenamento depende apenas do acoplamento entre momentos magnéticos segundos vizinhos, em outras palavras, a escolha do parâmetro de ordem (4.54) faz com que a contribuição dos pares de interação entre momentos magnéticos primeiros vizinhos se anula. Além disso, a partir de (4.56), concluímos que à medida que a intensidade da constante de troca entre os spins primeiros vizinhos aumenta, o módulo da magnetização descrita por (4.54) cresce, indicando o favorecimento dessa fase. Por fim, substituindo (4.53) e (4.54) nas equações (4.43), (4.44) e (4.45), obtemos que as equações de campo médio para esse ordenamento são dadas por

$$m_c = \sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \left[\langle f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \theta_c \cos \varphi_c + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \theta_c \sin \varphi_c + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^z f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \cos \theta_c \right], \quad (4.57)$$

$$\theta_c = \tan^{-1} \left[\frac{\sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \cos \varphi_c + \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle \sin \varphi_c}{\sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^z f_{\vec{k}, \mu'} \rangle} \right], \quad (4.58)$$

$$\varphi_c = \tan^{-1} \left[\frac{\sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^y f_{\vec{k}, \mu'} \rangle}{\sum_{\vec{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_{\mu, \mu'} \langle f_{\vec{k}+\vec{Q}_c, \mu}^\dagger J_{\mu\mu'}^x f_{\vec{k}, \mu'} \rangle} \right]. \quad (4.59)$$

Resolvendo as equações (4.57), (4.58) e (4.59) autoconsistentemente com $\mathcal{J}_0 = 0.6$ e variando

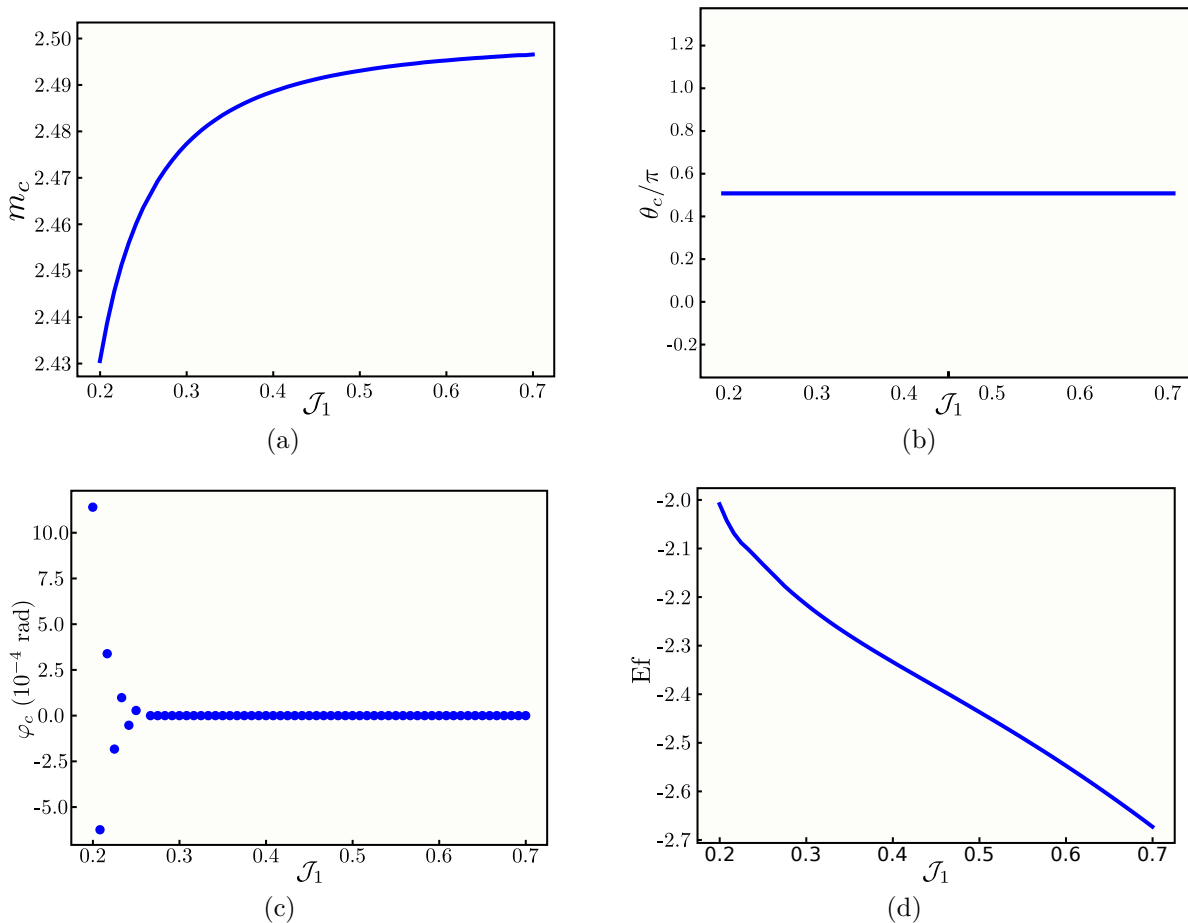


Figura 4.9: Solução autoconsistente das equações de campo médio (4.57), (4.58) e (4.59) para a fase C-AFM como função da interação de troca entre momentos magnéticos segundos vizinhos (\mathcal{J}_1): (a) Magnetização. (b) Ângulo polar. (c) Ângulo azimutal. (d) Energia de Fermi.

\mathcal{J}_1 , obtemos os resultados ilustrados na Fig.(4.9). Na Fig.(4.9a) vemos que como esperado, à medida que \mathcal{J}_1 aumenta, e conseqüentemente, a constante de torça efetiva \mathcal{J}_{ef} , o valor do módulo da magnetização (m_c) do ordenamento C-AFM cresce, tendendo a saturar no valor $5/2$, que corresponde à máxima projeção do momento angular total. Quanto à direção do vetor de magnetização, a Fig. (4.9b) nos mostra que o vetor se encontra no plano para a solução encontrada e, em particular, apontando na direção x , como mostrado na Fig.(4.9c). Além disso, a energia de Fermi do sistema foi determinada simultaneamente para cada solução autoconsistente, de tal modo a manter a ocupação unitária dos elétrons f , como mostrado na Fig.(4.9d).

4.2.6 Transição de fase entre o estado de Néel e o estado C-AFM

Determinadas as soluções autoconsistentes tanto para a fase de Néel, Fig.(4.7), quanto para a fase C-AFM, Fig.(4.9), calculamos a energia do sistema como função da interação de troca entre os momentos magnéticos segundos vizinhos (\mathcal{J}_1) para ambas as fases, como mostrado na Fig.(4.10). Esse resultado nos mostra que à medida que \mathcal{J}_1 aumenta, a energia da fase de Néel cresce enquanto a energia da fase C-AFM decresce, havendo um cruzamento entre elas em $\mathcal{J}_1^c \approx 0.3$. Logo, como o estado mais favorável do sistema é aquele que possui a menor energia, na região em que $\mathcal{J}_1 < \mathcal{J}_1^c$, o estado de Néel é estado fundamental do sistema. Entretanto, quando $\mathcal{J}_1 > \mathcal{J}_1^c$, o estado C-AFM passa a ser o estado fundamental do sistema. Esse comportamento caracteriza uma transição de fase de primeira ordem que, como já discutido anteriormente, é caracterizada pela quebra da simetria C_4 no ordenamento magnético, como ilustrado na Fig.(4.11).

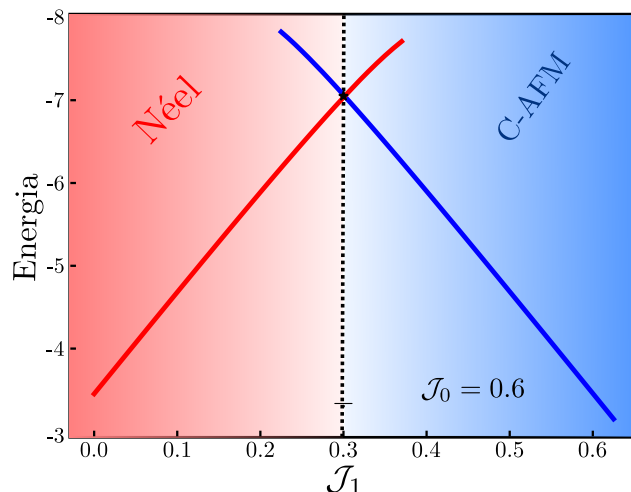


Figura 4.10: Energia do sistema como função da interação de troca entre momentos magnéticos segundos vizinhos (\mathcal{J}_1) tanto para a fase de Néel (em vermelho) quanto para a fase C-AFM (em azul), mantendo fixo o acoplamento entre momentos magnéticos primeiros vizinho ($\mathcal{J}_0 = 0.6$).

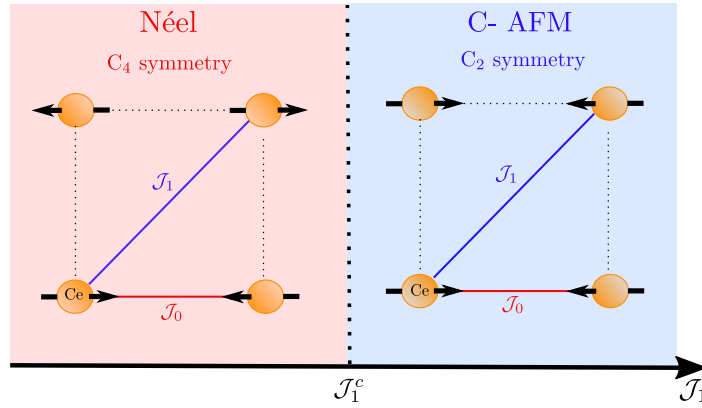


Figura 4.11: Representação esquemática da transição de fase prevista em (4.10) entre a fase de Néel e a fase C-AFM com $\mathcal{J}_1^c \approx 0.3$, considerando $\mathcal{J}_0 = 0.6$.

4.2.7 Quebra de simetria nos graus de liberdade de carga

Com o intuito de analisarmos a resposta dos graus de liberdade de carga nas fases ordenadas descritas nas seções anteriores, definimos o operador

$$A_f = \sum_{j,\tau,\sigma} \left(f_{j,\tau,\sigma}^\dagger f_{j+\hat{x},\tau,\sigma} - f_{j,\tau,\sigma}^\dagger f_{j+\hat{y},\tau,\sigma} + h.c. \right), \quad (4.60)$$

onde $f_{j,\tau,\sigma}^\dagger$ é o operador fermiônico que um elétron no pseudo orbital τ com projeção σ , localizado no sítio j . No espaço de momentos, a Eq.(4.60) é escrito como

$$A_f = \sum_{\vec{k},\tau,\sigma} [\cos(k_x) - \cos(k_y)] f_{\vec{k},\tau,\sigma}^\dagger f_{\vec{k},\tau,\sigma}, \quad (4.61)$$

onde \vec{k} pertence a zona de Brillouin magnética do ordenamento correspondente. O valor esperado desse operador ($\langle A_f \rangle$) quantifica a diferença entre as probabilidades de um elétron se mover através dos mesmos orbitais e com a mesma projeção de pseudo spin σ entre duas direções perpendiculares entre si. Em particular, devido às soluções de campo médio encontradas, Figs.(4.7) e (4.9), analisamos esse valor esperado considerando as direções x e y .

Ao determinarmos o valor esperado do operador (4.61) no estado fundamental do sistema, esperamos que ele seja nulo caso o estado possua a simetria C_4 pois, nesse caso, o estado eletrônico no sítio $j + \hat{x}$ é equivalente ao estado no sítio $j + \hat{y}$, ou seja,

$$|j + \vec{y}\rangle = R_z(\pi/2) |j + \vec{x}\rangle, \quad (4.62)$$

onde $R_z(\pi/2)$ é operador de rotação de um ângulo de 90° em torno do eixo z . Contudo, caso o sistema não possua essa simetria, o valor esperado desse operador deve assumir um valor finito e não nulo, indicando que os estados no sítio $j + \hat{x}$ e no sítio $j + \hat{y}$ são inequivalentes, isto é,

$$|j + \vec{y}\rangle \neq R_z(\pi/2) |j + \vec{x}\rangle. \quad (4.63)$$

A Fig.(4.12) mostra o valor esperado do operador (4.61) no estado de Néel para $\mathcal{J}_1 < \mathcal{J}_1^c$ e no estado C-AFM para $\mathcal{J}_1 > \mathcal{J}_1^c$. Com base nesse resultado, concluímos que esse valor esperado é nulo na região do diagrama de fases em que o estado fundamental do sistema é o estado de Néel e onde a simetria C_4 está presente. Por outro lado, esse valor esperado assume um valor não nulo na região em que o estado fundamental do sistema é o estado C-AFM que possui simetria C_2 , isto é, nesse regime, o sistema é invariante sob rotações de 180° em torno do eixo z . Portanto, os graus de liberdade de carga dos elétrons f repondem à quebra de simetria C_4 ocorrida nos graus de liberdade magnéticos desses elétrons. Essa resposta se deve ao fato de que os graus de liberdade de spin e os graus de liberdade orbitais dos elétrons f estão fortemente correlacionados devido à intensa interação spin-órbita à qual esses elétrons estão sujeitos.

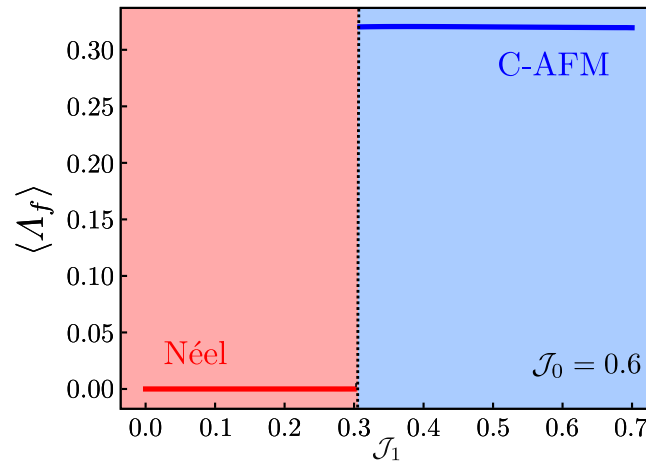


Figura 4.12: Valor esperado do operador definido em (4.61) no estado fundamental sistema para $\mathcal{J}_1 < \mathcal{J}_1^c$ e $\mathcal{J}_1 > \mathcal{J}_1^c$.

O operador Λ_f , Eq.(4.61), é definido em termos dos graus de liberdade dos elétrons f nos

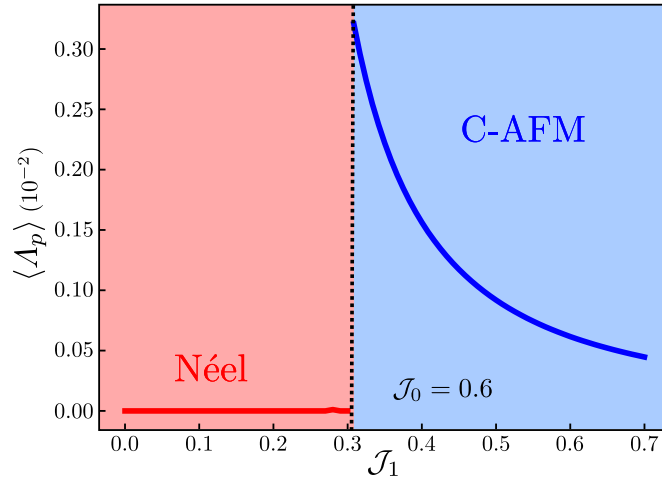


Figura 4.13: Valor esperado do operador definido em (4.65) no estado fundamental sistema para $\mathcal{J}_1 < \mathcal{J}_1^c$ e $\mathcal{J}_1 > \mathcal{J}_1^c$.

estados ocupados do sistema. Entretanto, devido ao termo de hibridização do sistema que mistura os elétrons do tipo f com os elétrons do tipo p , esperamos que ao resolvermos o problema autoconsistentemente, uma resposta análoga à encontrada para os graus de liberdade de carga dos elétrons f , Fig.(4.12), seja encontrada para os graus de liberdade de carga dos elétrons p . Definindo o operador

$$A_p = \sum_{j,\lambda,\sigma} \left(p_{j,\lambda,\sigma}^\dagger p_{j+\hat{x},\lambda,\sigma} - p_{j,\lambda,\sigma}^\dagger p_{j+\hat{y},\lambda,\sigma} + h.c. \right), \quad (4.64)$$

onde $p_{j,\lambda,\sigma}^\dagger$ é o operador que cria um elétrons p no pseudo orbital λ com projeção σ localizado no sítio j . No espaço de momentos, esse operador é escrito como

$$A_p = \sum_{\vec{k},\lambda,\sigma} [\cos(k_x) - \cos(k_y)] p_{\vec{k},\lambda,\sigma}^\dagger p_{\vec{k},\lambda,\sigma}, \quad (4.65)$$

onde \vec{k} pertence a zona de Brillouin magnética do ordenamento correspondente.

Calculando o valor esperado do operador (4.65) no estado de Néel para $\mathcal{J}_1 < \mathcal{J}_1^c$ e no estado C-AFM para $\mathcal{J}_1 > \mathcal{J}_1^c$, obtemos que, como esperado, os graus de liberdade de carga dos elétrons p também respondem à quebra de simetria C_4 ocorrida nos graus de liberdade magnéticos dos elétrons f na fase C-AFM, como mostrado na Fig.(4.13). Entretanto, o salto no valor do valor esperado

do operador Λ_p ao passar de uma fase para outra é duas ordens de grandeza menor do que o salto observado no valor esperado do operador Λ_f . Esse comportamento se deve ao fato de que no modelo a hibridização é o único fator responsável por conectar os elétrons f e p . Se considerarmos outros mecanismos que acoplem esses dois tipos de elétrons, como o acoplamento Kondo, essa resposta dos graus de liberdade de carga dos elétrons p deve ser amplificada. Além disso, a Fig.(4.13) nos mostra uma queda na amplitude do valor esperado do operador Λ_p com o aumento da intensidade da interação de troca entre momentos magnéticos segundos vizinhos na região em que $\mathcal{J}_1 > \mathcal{J}_1^c$, indicando uma diminuição da anisotropia nos graus de liberdade eletrônicos dos elétrons p com o aumento de \mathcal{J}_1 . Podemos especular que essa diminuição possa ser posteriormente associada ao decréscimo da anisotropia observada na resistividade a partir do valor crítico de campo magnético $B_c=50\text{T}$. Esperamos que com o aumento do campo magnético, e portanto, com o aumento do valor de \mathcal{J}_1 , a partir do campo magnético B^* , o valor da anisotropia, e conseqüentemente, o valor esperado dos operadores (4.61) e (4.65), comecem a decrescer até que sejam suprimidos.

Por fim, plotando a superfície de Fermi do sistema na zona de Brillouin quadrada na região em que o estado fundamental do sistema é o estado C-AFM, Fig.(4.14), observamos que ela não possui simetria C_4 , apresentando, por outro lado, a mesma simetria C_2 do ordenamento magnético C-AFM. Como os estados eletrônicos em torno da superfície de Fermi são os mais relevantes para a determinação de propriedades de transporte como, por exemplo, a resistividade, esperamos que essas propriedades apresentem anisotropias devido à essa quebra de simetria. Além disso, diferentemente do que se observa experimentalmente, no nosso modelo, a superfície de Fermi na fase ordenada é menor do que na fase sem ordenamento magnético. Esse comportamento pode ser devido à ausência de correlações no modelo. Como perspectiva futura, é interessante implementarmos a técnica de bósons escravos[33], a fim de possivelmente observarmos o aumento na superfície de Fermi quando o estado fundamental do sistema apresenta o ordenamento magnético C-AFM e além disso, obtermos uma massa efetiva eletrônica mais próxima da observada experimentalmente.

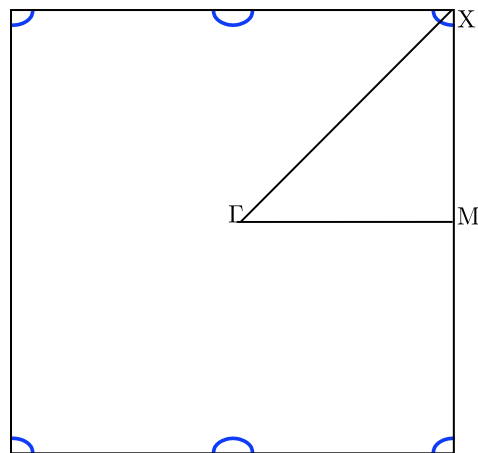


Figura 4.14: Ilustração da superfície de Fermi do sistema na fase ordenada C-AFM para os parâmetros de campo médio $m_c = 0.6$, $\theta_c = \pi/2$, $\phi_c = 0$ e cuja energia de Fermi $E_f = -2.54314$. Γ , M e X denotam os pontos de simetria da zona de Brillouin quadrada cujas coordenadas são $(0, 0)$, $(\pi, 0)$ e (π, π) , respectivamente.

Capítulo 5

Conclusões

Nesse trabalho, estudamos a quebra espontânea de simetria de rotação de um ângulo de 90° em torno do eixo z (denotada de simetria C_4) dos graus de liberdade eletrônicos (tanto de carga quanto de momento magnético) do composto CeRhIn_5 . Em outras palavras, estudamos a possibilidade da existência da chamada fase nemática nesse composto do tipo férmion pesado.

No modelo de bandas do composto na ausência de ordenamento magnético, analisamos os efeitos da interação coulombiana entre os elétrons do tipo f e do tipo p via a aproximação de campo médio, tomando a hibridização como parâmetro de ordem da transição. Nesse caso, concluímos que a transição de fase para um estado cuja simetria C_4 é quebrada não ocorre, indicando que mais ingredientes são necessários para a descrição do fenômeno somente via o canal de carga.

No estudo do comportamento da densidade eletrônica dos diferentes níveis ocupados pelo elétrons do tipo f do sistema na presença de um campo magnético externo paralelo ao eixo c do cristal, concluímos que para campos magnéticos da ordem de $B \approx 8\text{T}$, a ocupação eletrônica dos estados desses elétrons é dominada pelo orbital correspondente à projeção z do momento angular total igual a $5/2$, corroborando especulações experimentais[8, 27, 29]. Com base nesse resultado, assumimos que na presença de altos campos magnéticos, a hibridização entre os átomos de cério e índio localizados no plano basal da estrutura do composto aumenta, implicando no aumento da interação de troca antiferromagnética entre os momentos magnéticos dos átomos de cério segundos vizinhos, gerando um cenário de competição entre os acoplamentos antiferromagnéticos entre momentos magnéticos primeiros e segundos vizinhos.

No modelo de competição entre momentos magnéticos primeiros e segundos vizinhos dos átomos de cério, obtivemos uma transição de fase de um ordenamento magnético do tipo Néel que possui simetria C_4 , para um ordenamento do tipo C-AFM que apresenta simetria de rotação por um ângulo de 180° em torno do eixo z , chamada de simetria C_2 . Logo, nesse cenário, observamos

uma transição de fase caracterizada pela quebra da simetria C_4 nos graus de liberdade magnéticos dos elétrons f do sistema. Além disso, verificamos através de um parâmetro de ordem que mede a diferença entre as probabilidades de um elétron do tipo f se mover em duas direções perpendiculares entre si que, na fase magnética ordenada cuja simetria C_4 é quebrada, os graus de liberdade de carga desses elétrons apresentam a mesma quebra de simetria. Concluimos que essa resposta se deve ao fato de os graus de liberdade orbital e de spin do sistema desses elétrons estarem fortemente correlacionados devido à intensa interação spin-órbita à qual estão sujeitos. Verificamos também que o termo de hibridização entre os elétrons do tipo f e do tipo p transporta a anisotropia nos graus de liberdade dos elétrons f para os elétrons p , refletindo na superfície de Fermi do sistema, que apresenta a mesma simetria da fase ordenada em que a simetria C_4 foi quebrada. Contudo, diferentemente do observado experimentalmente[28], essa superfície de Fermi é menor em relação à superfície de Fermi na fase em que a simetria C_4 está presente. Isso possivelmente se deve ao fato de não haver correlações eletrônicas no modelo considerado, que podem ser implementadas através da técnica de bósons escravos[33].

De maneira geral, nesse trabalho, concluimos que o cenário de competição entre acoplamentos antiferromagnéticos entre os momentos magnéticos dos átomos de cério primeiros e segundos vizinhos localizados no plano basal da estrutura cristalina, cuja origem está no aumento da hibridização entre os orbitais dos átomos de cério e índio na presença de altos campos magnéticos, produz a quebra da simetria C_4 nos graus eletrônicos do sistema, podendo ser um mecanismo microscópico razoável para a formação da fase nemática nesse sistema.

Bibliografia

- [1] P. Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 2015.
- [2] L. Jiao, Z. F. Weng, M. Smidman, D. Graf, J. Singleton, E. D. Bauer, J. D. Thompson, and H. Q. Yuan. Magnetic field-induced fermi surface reconstruction and quantum criticality in. *Philosophical Magazine*, 97(36):3446–3459, 2017.
- [3] R Settai, H Shishido, S Ikeda, Y Murakawa, M Nakashima, D Aoki, Y Haga, H Harima, and Y Onuki. Quasi-two-dimensional fermi surfaces and the de haas-van alphen oscillation in both the normal and superconducting mixed states of CeCoIn₅. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(27):L627–L634, jun 2001.
- [4] Hiroaki Shishido, Rikio Settai, Dai Aoki, Shugo Ikeda, Hirokazu Nakawaki, Noriko Nakamura, Tomoya Iizuka, Yoshihiko Inada, Kiyohiro Sugiyama, Tetsuya Takeuchi, Kouichi Kindo, Tatsuo C. Kobayashi, Yoshinori Haga, Hisatomo Harima, Yuji Aoki, Takahiro Namiki, Hideyuki Sato, and Yoshichika Anuki. Fermi surface, magnetic and superconducting properties of larhin₅ and cetin₅ (t: Co, rh and ir). *Journal of the Physical Society of Japan*, 71(1):162–173, 2002.
- [5] Wei Bao, P. G. Pagliuso, J. L. Sarrao, J. D. Thompson, Z. Fisk, J. W. Lynn, and R. W. Erwin. Incommensurate magnetic structure of cerhin₅. *Phys. Rev. B*, 62:R14621–R14624, Dec 2000.
- [6] D M Fobes, E D Bauer, J D Thompson, A Sazonov, V Hutanu, S Zhang, F Ronning, and M Janoschek. Low temperature magnetic structure of CeRhIn₅ by neutron diffraction on absorption-optimized samples. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(17):17LT01, mar 2017.
- [7] Georg Knebel, Dai Aoki, Jean-Pascal Brison, and Jacques Flouquet. The quantum critical point in cerhin₅: A resistivity study. *Journal of the Physical Society of Japan*, 77(11):114704, 2008.

- [8] Filip Ronning, T. Helm, K. Shirer, M. D. Bachmann, L. Balicas, Mun Keat Chan, Brad Ramshaw, Ross David McDonald, Fedor Fedorovich Balakirev, M. Jaime, Eric Dietzgen Bauer, and P.J.W. Moll. Electronic in-plane symmetry breaking at field-tuned quantum criticality in cer₁₁₅. *Nature (London)*, 548(7667), 8 2017.
- [9] R. A. Borzi, S. A. Grigera, J. Farrell, R. S. Perry, S. J. S. Lister, S. L. Lee, D. A. Tennant, Y. Maeno, and A. P. Mackenzie. Formation of a nematic fluid at high fields in sr₃ru₂o₇. *Science*, 315(5809):214–217, 2007.
- [10] V. Hinkov, D. Haug, B. Fauqué, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, C. Bernhard, C. T. Lin, and B. Keimer. Electronic liquid crystal state in the high-temperature superconductor yba₂cu₃o_{6.45}. *Science*, 319(5863):597–600, 2008.
- [11] S. Avci, O. Chmaissem, J. M. Allred, S. Rosenkranz, I. Eremin, A. V. Chubukov, D. E. Bugaris, D. Y. Chung, M. G. Kanatzidis, J. P. Castellán, J. A. Schlueter, H. Claus, D. D. Khalyavin, P. Manuel, A. Daoud-Aladine, and R. Osborn. Magnetically driven suppression of nematic order in an iron-based superconductor. *Nature Communications*, 5, 5 2014.
- [12] Takahiro Maehira, Takashi Hotta, Kazuo Ueda, and Akira Hasegawa. Relativistic band-structure calculations for cetin₅ (t = ir and co) and analysis of the energy bands by using tight-binding method. *Journal of the Physical Society of Japan*, 72(4):854–864, 2003.
- [13] Lin Jiao, Ye Chen, Yoshimitsu Kohama, David Graf, E. D. Bauer, John Singleton, Jian-Xin Zhu, Zongfa Weng, Guiming Pang, Tian Shang, Jinglei Zhang, Han-Oh Lee, Tuson Park, Marcelo Jaime, J. D. Thompson, Frank Steglich, Qimiao Si, and H. Q. Yuan. Fermi surface reconstruction and multiple quantum phase transitions in the antiferromagnet cer₁₁₅. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(3):673–678, 2015.
- [14] S. Hunklinger. *Festkörperphysik*. De Gruyter Studium. De Gruyter, 2017.
- [15] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid State Physics*. HRW international editions. Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [16] H. Hegger, C. Petrovic, E. G. Moshopoulou, M. F. Hundley, J. L. Sarrao, Z. Fisk, and J. D. Thompson. Pressure-induced superconductivity in quasi-2d cer₁₁₅. *Phys. Rev. Lett.*, 84:4986–4989, May 2000.

- [17] Hiroaki Shishido, Rikio Settai, Hisatomo Harima, and Yoshichika Ōnuki. A drastic change of the fermi surface at a critical pressure in cerhin₅: dhva study under pressure. *Journal of the Physical Society of Japan*, 74(4):1103–1106, 2005.
- [18] Donavan Hall, E. C. Palm, T. P. Murphy, S. W. Tozer, Z. Fisk, U. Alver, R. G. Goodrich, J. L. Sarrao, P. G. Pagliuso, and Takao Ebihara. Fermi surface of the heavy-fermion superconductor cecoin₅ : the de haas–van alphen effect in the normal state. *Phys. Rev. B*, 64:212508, Nov 2001.
- [19] Sunil Nair, O. Stockert, U. Witte, M. Nicklas, R. Schedler, K. Kiefer, J. D. Thompson, A. D. Bianchi, Z. Fisk, S. Wirth, and F. Steglich. Magnetism and superconductivity driven by identical 4f states in a heavy-fermion metal. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107(21):9537–9540, 2010.
- [20] R. Movshovich, M. Jaime, J. D. Thompson, C. Petrovic, Z. Fisk, P. G. Pagliuso, and J. L. Sarrao. Unconventional superconductivity in CeIrIn₅ and cecoin₅: Specific heat and thermal conductivity studies. *Phys. Rev. Lett.*, 86:5152–5155, May 2001.
- [21] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum Mechanics*. Number v. 2 in Quantum Mechanics. Wiley, 1991.
- [22] P. W. Anderson. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, 124:41–53, Oct 1961.
- [23] J. C. Slater and G. F. Koster. Simplified lcao method for the periodic potential problem. *Phys. Rev.*, 94:1498–1524, Jun 1954.
- [24] Takashi Hotta and Kazuo Ueda. Construction of a microscopic model for f-electron systems on the basis of a $j - j$ coupling scheme. *Phys. Rev. B*, 67:104518, Mar 2003.
- [25] M.T. Hutchings. Point-charge calculations of energy levels of magnetic ions in crystalline electric fields**this work was supported by the u.s. air force, the u.k. department of and industrial research, and the u.s. atomic energy commission. volume 16 of *Solid State Physics*, pages 227 – 273. Academic Press, 1964.
- [26] T. Willers, Z. Hu, N. Hollmann, P. O. Körner, J. Gegner, T. Burnus, H. Fujiwara, A. Tanaka, D. Schmitz, H. H. Hsieh, H.-J. Lin, C. T. Chen, E. D. Bauer, J. L. Sarrao, E. Goremychkin, M. Koza, L. H. Tjeng, and A. Severing. Crystal-field and kondo-scale investigations of Cemin₅ ($m = \text{Co, ir, and rh}$): A combined x-ray absorption and inelastic neutron scattering study. *Phys. Rev. B*, 81:195114, May 2010.

- [27] P. F. S. Rosa, S. M. Thomas, F. F. Balakirev, E. D. Bauer, R. M. Fernandes, J. D. Thompson, F. Ronning, and M. Jaime. Enhanced hybridization sets the stage for electronic nematicity in cerhin₅. *Phys. Rev. Lett.*, 122:016402, Jan 2019.
- [28] Lin Jiao, Ye Chen, Yoshimitsu Kohama, David Graf, E. D. Bauer, John Singleton, Jian-Xin Zhu, Zongfa Weng, Guiming Pang, Tian Shang, Jinglei Zhang, Han-Oh Lee, Tuson Park, Marcelo Jaime, J. D. Thompson, Frank Steglich, Qimiao Si, and H. Q. Yuan. Fermi surface reconstruction and multiple quantum phase transitions in the antiferromagnet cerhin₅. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(3):673–678, 2015.
- [29] T. Hattori Y. Tokunaga S. Kambe P. L. Kuhns A. P. Reyes J. D. Thompson P. G. Pagliuso R. R. Urbano G. G. Lesseux, H. Sakai. arxiv:1905.02861.
- [30] M. Sundermann, A. Amorese, F. Strigari, B. Leedahl, L. H. Tjeng, M. W. Haverkort, H. Gretarsson, H. Yavaş, M. Moretti Sala, E. D. Bauer, P. F. S. Rosa, J. D. Thompson, and A. Severing. Orientation of the ground-state orbital in cecoin₅ and cerhin₅. *Phys. Rev. B*, 99:235143, Jun 2019.
- [31] J. R. Schrieffer and P. A. Wolff. Relation between the anderson and kondo hamiltonians. *Phys. Rev.*, 149:491–492, Sep 1966.
- [32] G. Giuliani, G. Vignale, and Cambridge University Press. *Quantum Theory of the Electron Liquid*. Masters Series in Physics and Astronomy. Cambridge University Press, 2005.
- [33] Piers Coleman. New approach to the mixed-valence problem. *Phys. Rev. B*, 29:3035–3044, Mar 1984.