

Estudo do magnetismo em sistemas antiferromagnéticos simples a base de Gadolínio.

Luís André Gil¹, Juan C. P. Campoy²

1. Estudante de mestrado da Uni. Fed. de São João Del Rei - UFSJ; *luis.agil@live.com

2. Professor do Depto. de Ciências Naturais - DCNAT, UFSJ, São João Del Rei/MG

Palavras Chave: *Magnetismo, Antiferromagnetismo, Entropia Magnética.*

Introdução

Os compostos com ordem antiferromagnética têm despertado um grande interesse científico devido à grande variedade de fenômenos magnéticos encontrados nestes sistemas, como a reorientação de spin, a reorientação orbital, a magneto-estricção, o reordenamento de carga etc. Em particular, compostos antiferromagnéticos a base de Gadolínio (Gd) apresentam, frequentemente, importantes contribuições magneto-elásticas que podem provocar uma quebra de simetria nas intensidades das sub-redes magnéticas. Esses fenômenos encontram-se sobrepostos às interações magnéticas entre os íons.

Em geral, um tratamento teórico semi-clássico para um sistema antiferromagnético simples, onde os efeitos devido as interações magneto-elásticas e a anisotropia são desprezíveis, pode ser feito considerando um hamiltoniano formado por duas sub-redes magnéticas acopladas e submetidas a um campo magnético externo [1,2].

O presente trabalho teve como objetivo o estudo das propriedades magnetocalóricas de compostos intermetálicos com ordem antiferromagnética simples. A proposta inicial foi o estudo de antiferromagnetos a base de Gd, que compreenderam os compostos GdSi [3] e GdNiGe₃ [4]. Entretanto, os resultados obtidos nos permitiram estender os cálculos a alguns intermetálicos a base de Eu, como os compostos EuNiGe₃ [5] e EuMg₂ [6].

Resultados e Discussão

Para o propósito de estudo foi realizado o cálculo auto-consistente do hamiltoniano modelo [2], a partir da diagonalização do mesmo. Foram obtidas as autofunções e seus respectivos autovalores, os quais permitiram o cálculo da dependência da magnetização e do calor específico em função da temperatura e do campo magnético aplicado, assim como a entropia magnética e a variação da entropia magnética para um campo aplicado ao longo do eixo fácil.

A Figura 1 mostra o cálculo da susceptibilidade magnética e do calor específico (linhas contínuas) comparada a resultados experimentais (círculos), cujos comportamentos mostram um máximo sobre a temperatura de transição de 26,2 K, o que caracteriza a transição de fase antiferro-paramagnética.

O estudo das transições de fase ordem-desordem também pode ser realizado sob a perspectiva da entropia magnética do sistema, que permite obter o potencial termodinâmico definido pela variação da entropia magnética, ΔS_{mag} , que por sua vez nos dá uma estimativa do efeito magnetocalórico (EMC) no material. A Figura 2 apresenta o cálculo da variação da entropia para uma variação de campo $\Delta H = 2T$. Este potencial em um antiferromagneto simples apresenta duas regiões de variação, uma positiva (EMC inverso) e outra negativa (EMC direto). A consequência deste comportamento é um resfriamento abaixo da temperatura de transição e um aquecimento para temperaturas acima da transição,

quando o material é submetido a uma variação do campo magnético (ΔH) aplicado de forma adiabática.

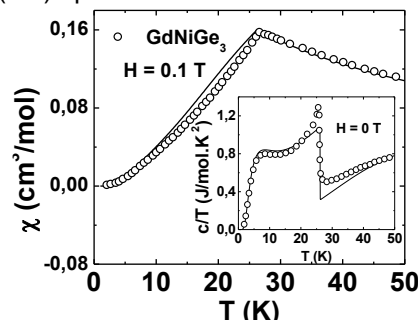


Figura 1. Susceptibilidade magnética e calor específico (inset) em função da temperatura. Resultados experimentais obtidos da referência [4].

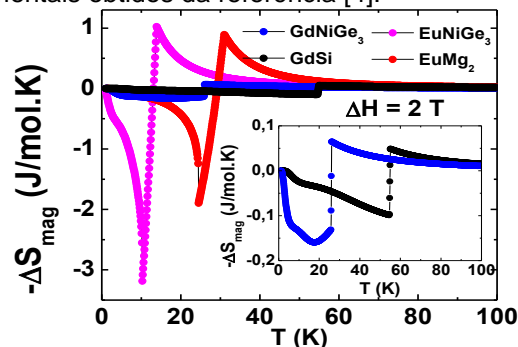


Figura 2. ΔS_{mag} em função da temperatura para uma variação do campo magnético de 0 a 2 T.

Conclusões

As simulações obtidas permitiram concluir que o hamiltoniano modelo descreve de maneira satisfatória as propriedades magnéticas nestes compostos.

A análise dos resultados mostrou alguns dos aspectos termodinâmicos envolvidos na dinâmica da transição de fase, como o EMC inverso. Abaixo da transição as sub-redes magnéticas encontram-se antialinhadas, devido a interação de troca negativa inter-subredes, o que se reflete como uma variação positiva da entropia. Por outro lado, o máximo verificado sobre a magnetização, deve-se ao alinhamento das sub-redes na direção do campo aplicado.

Os cálculos demonstraram ainda que as interações antiferromagnéticas, em relação as demais contribuições como a anisotropia, efeito magneto-elástico etc, desempenham a principal contribuição para as propriedades magnetocalóricas nestes compostos.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro fornecido pela UFSJ e Fapemig.

[1] L. Néel, Ann. Phys. 17, 64 (1932).

[2] P. J. von Ranke et. al J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 056004.

[3] L. D. Tung et. al Phys. Rev. B 71, 144410 (2005).

[4] D. C. Johnston Phys. Rev. Lett. 109, 077201 (2012).

[5] R. J. Goetsch et. al Phys. Rev. B 87, 064406 (2013).

[6] K. H. J. Buschow et. al J. Appl. Phys. 49, 1510 (1978).