

rec. R.S. 74

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE FÍSICA

RESISTIVIDADE ELÉTRICA DOS METAIS MAGNÉTICOS E SUAS LIGAS  
DILUIDAS A BAIXAS TEMPERATURAS

Irene M. Strauch Aveline

Dissertação realizada sob a orientação do Dr. Arno Holz, apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Trabalho parcialmente financiado pelas seguintes instituições: Conselho Nacional de Pesquisas, Agência Internacional de Energia Atômica, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul, Banco Nacional do Desenvolvimento Econômico e Agência Sueca para o Desenvolvimento Internacional (SIDA).

Para a Zulika com os meus agradecimentos pela ajuda  
que sempre reubi

Lima

28/3/74

Este trabalho foi realizado sob a orientação do Prof. Arno Holz,  
a quem expresso meus agradecimentos.

## RESUMO

Neste trabalho estudamos o problema da condução utilizando o modelo das duas correntes de elétrons de spins opostos, incluindo efeitos de espalhamento com inversão de spin. Em particular, discutimos teoricamente a contribuição de espalhamentos elétron-magnon à parte da resistividade elétrica que depende da temperatura, em metais e ligas magnéticas, no limite de baixas temperaturas.

## ABSTRACT

In this work we study the conductivity problem by spin up and spin down electron currents, taking spin-flip process into account. In particular we discuss theoretically the low temperature contribution to the temperature-dependent part of the electrical resistivity from electron-magnon scattering in magnetic metals and dilute alloys.

SUMÁRIO

(páginas)

Introdução . . . . .	1
CAP. I - TEORIA DE TRANSPORTES	
§1 - Introdução . . . . .	3
§2 - Equação de Boltzmann . . . . .	4
§3 - Solução da equação de Bloch - Aproximação do tempo de relaxação . . . . .	10
§4 - Justificativa para a solução da equação de Bloch na aproximação do tempo de relaxação . . . . .	15
§5 - Expressão para a resistividade elétrica na aproximação do tempo de relaxação . . . . .	19
§6 - Regra de Mathiessen . . . . .	20
CAP. II - CONDUTIVIDADE NOS METAIS DE TRANSIÇÃO	
§1 - Considerações gerais . . . . .	22
§2 - Modelos para os elétrons de condução . . . . .	23
§3 - Interação de troca s-d . . . . .	25
§4 - Processos de espalhamento . . . . .	29
CAP. III - MODELO DE DUAS CORRENTES	
§1 - Origens do modelo . . . . .	33
§2 - Formalismo para o "spin-mixing model" . . . . .	36
§3 - Comprovação experimental . . . . .	37
CAP. IV - RESISTIVIDADE ELÉTRICA EM METAIS MAGNÉTICOS A BAIXAS TEMPERATURAS	
§1 - Introdução . . . . .	40
§2 - Expressão para $1/\gamma_{\uparrow\downarrow}$ . . . . .	41
§3 - Probabilidades de emissão e absorção de magnons . . . . .	44
§4 - Aproximação de Holstein-Primakoff . . . . .	45

(páginas)

§5 - Cálculo das probabilidades de transição . . . . .	47
§6 - Cálculo de $1/\tilde{\gamma}_{\nu}$ não perturbado . . . . .	49
§7 - Cálculo de $1/\tilde{\gamma}_{\nu}$ perturbado . . . . .	54
§8 - Discussão dos resultados e conclusões . . . . .	62
REFERÊNCIAS . . . . .	68

## INTRODUÇÃO

A resistividade elétrica dos metais magnéticos a baixas temperaturas tem sido alvo de muita investigação experimental. Contudo, do ponto de vista teórico, nem sempre seu comportamento tem sido satisfatoriamente explicado, restando muitos pontos a serem esclarecidos. Um grande passo nesse sentido foi dado por Campbell et al.<sup>(13)</sup> através do seu modelo de "duas correntes". Foi demonstrado qualitativamente que em metais ferromagnéticos do grupo de transição 3d e suas ligas, os desvios da Regra de Mathiessen são devidos principalmente aos processos de spin-flip que misturam correntes associadas com elétrons de spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$ .

Esse modelo foi usado com sucesso por Fert<sup>(16)</sup> para explicar quantitativamente o comportamento a baixas temperaturas da resistividade nos metais de transição ferromagnéticos: Fe, Co, Ni. Este estudo permitiu concluir que mesmo para os metais magnéticos cujos desvios da regra de Mathiessen não são consideráveis, espalhamentos envolvendo spin-flip, especialmente os espalhamentos elétron-magnon são predominantes na resistividade elétrica ideal desses metais a baixas temperaturas.

No presente trabalho, usando a hipótese acima, estendemos o estudo de Fert a fim de que possamos incluir dentro desse modelo o comportamento dos metais terras raras pesados. Discutimos também a contribuição à resistividade devido a presença de impurezas não magnéticas, para os dois grupos de transição (3d e 4f). Em ambos os casos os resultados teóricos quando comparados com os dados experimentais disponíveis apresentam-se em concordância satisfatória.

Os assuntos tratados neste trabalho estão assim distribuídos:

No capítulo I abordamos os aspectos mais importantes em teoria de transporte, uma vez que essa teoria constitui o ponto de

partida para o entendimento dos fenômenos de condução; ela é também a base formal do modelo de "duas correntes".

No capítulo II tratamos a condução dos metais de transição em geral. Apresentamos os vários modelos de condução para esses metais com ênfase no modelo de Kasuya<sup>(7)</sup>. Os processos de espalhamento e suas contribuições à resistividade são também aqui analisados.

O capítulo III foi reservado para uma revisão do modelo de "duas correntes" desde a sua origem em 1967, incluindo as contribuições teóricas posteriores, e as comprovações experimentais mais recentes.

Finalmente, no capítulo IV, desenvolvemos o estudo teórico da resistividade elétrica nos metais magnéticos e sua dependência com a temperatura. Concluindo o trabalho, discutimos os resultados obtidos e apresentamos as curvas teóricas do comportamento previsto, a baixas temperaturas.

## I - TEORIA DE TRANSPORTE

## § 1. Introdução

Numa análise rigorosa dos problemas de transporte em metais, raramente é possível tratar somente com propriedades médias, tais como velocidade média e energia média, mas é necessário determinar a distribuição das partículas com respeito a suas posições e velocidades.

O elemento básico em teoria de transporte é a função distribuição. Sua variação no tempo é governada pela equação de Boltzmann.

Neste capítulo vamos descrever o conjunto de elétrons de condução por intermédio de uma função distribuição  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ , a qual mede o número de portadores no estado  $\vec{k}$  e na vizinhança de  $\vec{r}$ . Definir a função distribuição como uma função do vetor de onda  $\vec{k}$  e da posição  $\vec{r}$  parece contraditório no sentido de que os estados de Bloch não são localizados e portanto não se pode tentar especificar, mesmo aproximadamente, a posição da partícula caso se conheça com certeza seu vetor de onda. Devemos então, sacrificar um pouco a precisão ao determinar o vetor de onda  $\vec{k}$ , se a função distribuição variar com a posição  $\vec{r}$ , o que corresponde a existência de gradientes de temperatura no espécime.

No equilíbrio,  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  depende somente da energia do estado  $\vec{k}$ ,  $E(\vec{k})$  e se reduz à função distribuição de Fermi

$$f^0(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)\beta} - 1} \quad (1)$$

onde  $\beta = 1/k_B T$  e  $\mu$  é a energia de Fermi.

Em princípio, as propriedades elétricas de um condutor ficam completamente especificadas uma vez conhecida  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ . Por exemplo, a contribuição de um elétron no estado  $\vec{k}$  para a corrente é dada pelo produto da carga,  $e$ , pela velocidade  $\vec{v}_k$  deste elétron.

Conseqüentemente, a densidade de corrente na posição  $\vec{r}$  e no tempo  $t$  é obtida simplesmente somando as contribuições individuais de todos os elétrons para a corrente. Esta soma é realizada integrando a velocidade sobre todos os valores de  $\vec{k}$  e ponderando cada velocidade pela probabilidade de distribuição  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ . Temos então:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v}_k f(\vec{k}, \vec{r}, t) d\vec{k} \quad (2)$$

onde  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  é normalizada dentro de um volume unitário.

Formalmente, o problema reside em encontrar a função distribuição correta, sujeita a certas condições de contorno. Essa tarefa é realizada em primeiro lugar, derivando a equação que  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  deve satisfazer, e a seguir resolvendo esta equação. A primeira etapa é relativamente simples no tratamento semiclassico. No entanto, a solução desta equação para  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  apresenta grandes dificuldades formais.

## § 2. Equação de Boltzmann

Vamos considerar a equação da continuidade para a função  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ , a qual relaciona a razão de variação de  $f$  com o número de partículas deixando um elemento de volume do espaço  $\vec{k}-\vec{r}$ , na ausência de colisões. Por uma simples generalização da equação da continuidade em três-dimensões temos:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\nabla_{\vec{r}} \cdot \left( f \frac{d\vec{r}}{dt} \right) - \nabla_{\vec{k}} \cdot \left( f \frac{d\vec{k}}{dt} \right) \quad (3)$$

Diferenciando os dois termos da direita, esta equação fica:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \nabla_{\vec{k}} f - f \left[ \nabla_{\vec{r}} \cdot \vec{v} + \nabla_{\vec{k}} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} \right] \quad (4)$$

Nesta última, o termo entre colchetes se anula, pois para elétrons:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e}{\hbar c} \left[ \vec{E}_c + \vec{v}_k \times \vec{H} \right] \quad e \quad \hbar \vec{v}_k = \nabla_k E(\vec{k}) \quad (5)$$

onde  $\vec{E}$  é o campo elétrico e  $\vec{H}$  o campo magnético.

A equação (4) fica então:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \vec{v}_k \cdot \nabla_k f - \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \nabla_k f \quad (6)$$

e constitui a equação de Liouville.

Vamos considerar somente o estado estacionário no qual  $\partial f / \partial t$  se anula, mas adicionamos ao lado direito da equação (6) um termo para permitir variações em  $f$  devido a colisões. Obtemos assim a equação de Boltzmann:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} = \vec{v}_k \cdot \nabla_k f + \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \nabla_k f \quad (7)$$

A variação espacial de  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  pode ser atribuída somente a uma variação em temperatura dada por:

$$\nabla_k f = \frac{\partial f}{\partial T} \nabla T \quad (8)$$

E usando as relações (5), a equação de Boltzmann fica:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E \cdot \nabla T \frac{\partial f}{\partial T} + \frac{e}{\hbar c} \left( \vec{E}_c + \vec{v}_k \times \vec{H} \right) \cdot \nabla_k f \quad (9)$$

Algumas das dificuldades encontradas na solução desta equação diferencial aparentemente simples, se tornam evidentes quando o termo de colisão  $\left. \partial f / \partial t \right)_{col}$  é escrito em sua forma explícita. O termo de colisão é, em geral, uma integral sobre todos os valores de  $\vec{k}$ , com  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  aparecendo no integrando, como mostraremos logo a seguir. A equação (9) torna-se então uma equação integro-diferencial de bastante complexidade.

Existe, no entanto, uma suposição que pode simplificar esta equação. Consiste no fato de que os campos elétricos aplicados e os gradientes de temperatura são geralmente pequenos. Se, por exemplo, está se medindo condutividade térmica, deseja-se determinar esta quantidade como uma função da temperatura, e nenhum resultado exato pode ser obtido se as duas extremidades da amostra estiverem com largas diferenças de temperaturas. As resultantes correntes de calor e eletricidade são conseqüentemente lineares em  $\nabla T$  e  $\vec{E}$ . Isto conduz à linearização da equação (9).

Expandimos  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  em potências de  $\vec{E}$  e  $\nabla T$  e mantemos somente os dois primeiros termos de tal modo que:

$$f \approx f^0 + f^1 \quad (10)$$

onde  $f^0$  é a função distribuição na situação de equilíbrio, definida por (1). Usando a (10), o termo de colisão fica:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} = \left. \frac{\partial f^1}{\partial t} \right)_{col} \quad (11)$$

pois  $\partial f^0 / \partial t$  se anula.

Lembrando que para elétrons,  $f^0$  depende de  $\vec{k}$  através de  $E(\vec{k})$  pela relação:

$$\nabla_{\vec{k}} f^0 = \hbar \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f^0}{\partial E} \quad (12)$$

então segue que o termo  $\vec{v} \times \vec{H} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^0$  se anula.

Desprezando termos de 2a. ordem em  $\nabla T$  e  $\vec{E}$ , a equação de Boltzmann linearizada fica:

$$\left. \frac{\partial f^1}{\partial t} \right)_{col} = \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \nabla T \frac{\partial f^0}{\partial T} + e \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f^0}{\partial E} + \frac{e}{\hbar c} \vec{v}_{\vec{k}} \times \vec{H} \cdot \nabla_{\vec{k}} f^1 \quad (13)$$

Esta é a forma mais simples em que pode ser colocada a equação de Boltzmann sem considerar um específico modelo e situação.

Vamos agora escrever explicitamente o termo de colisão  $\partial f / \partial t)_{col}$ . Para tanto, vamos introduzir a quantidade  $G(\vec{k}, \vec{k}')$ , definida como a probabilidade por unidade de tempo de que um elétron no estado  $\vec{k}$  seja espalhado para o estado  $\vec{k}'$ . Por enquanto, vamos assumir que  $G(\vec{k}, \vec{k}')$  é conhecido. Em termos de  $G(\vec{k}, \vec{k}')$ , podemos escrever o termo de colisão como segue:

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{col} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \left\{ G(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}') [1 - f(\vec{k})] - G(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}) [1 - f(\vec{k}')] \right\} d\vec{k}' \quad (14)$$

Nesta equação, o primeiro termo no integrando é igual ao número de elétrons espalhados do elemento de volume  $d\vec{k}$  no elemento de volume  $d\vec{k}'$ , por unidade de tempo. O fator  $G(\vec{k}, \vec{k}')$  dá a probabilidade a priori de que ocorra o espalhamento e  $f(\vec{k}')$  e  $[1 - f(\vec{k})]$  dão as probabilidades: 1º) que um elétron inicialmente ocupa o estado  $\vec{k}'$  e 2º) que o estado  $\vec{k}$  no qual este elétron será espalhado está inicialmente desocupado e pode, portanto, aceitar um elétron. Correspondentemente, o segundo termo no integrando é igual ao número de elétrons espalhados do elemento  $d\vec{k}$  para  $d\vec{k}'$ , por unidade de tempo.

Portanto, a variação da função distribuição com o tempo devido a colisões é dada pela diferença entre o número de elétrons deixando um certo elemento do volume e o número de elétrons entrando no mesmo elemento de volume, levando em consideração o Princípio de Pauli.

Na situação de equilíbrio, quando então  $f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f^0(E(\vec{k}))$ , o princípio do balanceamento detalhado requer que:

$$G(\vec{k}', \vec{k}) f^0(E(\vec{k}')) [1 - f^0(E(\vec{k}))] = G(\vec{k}, \vec{k}') f^0(E(\vec{k})) [1 - f^0(E(\vec{k}'))] \quad (15)$$

É razoável supor que a probabilidade de espalhamento  $G(\vec{k}, \vec{k}')$  não dependa dos campos elétrico ou magnético. Pode-se então usar a relação (15) para reescrever a (14) em termos da proba-

bilidade  $G(\vec{k}, \vec{k}')$ :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{col} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int G(\vec{k}, \vec{k}') f^0(E) [1 - f^0(E')] \left\{ \frac{f(\vec{k}') [1 - f(\vec{k})]}{f^0(E') [1 - f^0(E)]} - \frac{f(\vec{k}) [1 - f(\vec{k}')] }{f^0(E) [1 - f^0(E')]} \right\} d\vec{k}' \quad (16)$$

Usando ainda a relação (10) para escrever a função distribuição como a soma de dois termos: o primeiro sendo a função distribuição de Fermi e o segundo representando o desvio da função de seu valor de equilíbrio, a (16) fica:

$$\left. \frac{\partial f^1}{\partial t} \right|_{col} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int G(\vec{k}, \vec{k}') f^0(E) [1 - f^0(E')] \left\{ \frac{f^1(\vec{k}')}{f^0(E') [1 - f^0(E')]} - \frac{f^1(\vec{k})}{f^0(E) [1 - f^0(E)]} \right\} d\vec{k}' \quad (17)$$

onde aparecem somente os termos lineares em  $f^1$ .

É conveniente escrever:

$$f^1 = -\phi(\vec{k}, \vec{k}') \frac{\partial f^0}{\partial E} \quad (18)$$

a qual mantém a generalidade de  $f^1$  uma vez que  $\phi(\vec{k}, \vec{k}')$  não está definido. Como nós já vimos anteriormente, em geral esse desvio é pequeno. A relação linear entre causa e efeito, como na lei de Ohm é uma manifestação deste pequeno desvio, uma vez que essa relação linear mostra que na solução da equação de Boltzmann somente termos lineares em  $f^1$  precisam ser mantidos. Somente em semi-condutores sujeitos a fortes campos elétricos se observa desvios da lei de Ohm.

Por outro lado, a estatística de Fermi-Dirac temos:

$$-\frac{\partial f^0}{\partial E} = \frac{f^0(E) (1 - f^0(E))}{k_B T} \quad (19)$$

Usando as relações (19) e (18), a (17) fica:

$$\frac{\partial f}{\partial t}_{col} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int G(\vec{k}, \vec{k}') f^0(E) (1-f^0(E')) [\phi(\vec{k}') - \phi(\vec{k})] d\vec{k}' \quad (20)$$

a qual é conhecida como integral de colisão.

Pode-se usar, ainda a definição de probabilidade de transição de equilíbrio dada por:

$$P(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' = f^0(E) (1-f^0(E')) G(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}'$$

a qual representa o número real de transição por unidade de tempo quando o sistema está em equilíbrio termodinâmico. Com essa definição, uma forma alternativa para a (20) é:

$$\frac{\partial f}{\partial t}_{col} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int P(\vec{k}, \vec{k}') [\phi(\vec{k}') - \phi(\vec{k})] d\vec{k}' \quad (20')$$

A equação de Boltzmann linearizada dada pela relação (13), quando o termo de colisão é substituído pela integral (20), fica na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int G(\vec{k}, \vec{k}') f^0(E) (1-f^0(E')) [\phi(\vec{k}') - \phi(\vec{k})] d\vec{k}' = \\ = \frac{e}{\hbar c} \frac{\vec{v}}{k} \times \vec{H} \cdot \nabla_k f^1 - \frac{\vec{v}}{k} \cdot \nabla T \frac{\partial f^0}{\partial T} + e \vec{E} \cdot \frac{\vec{v}}{k} \frac{\partial f^0}{\partial E} \end{aligned} \quad (21)$$

a qual é conhecida por equação de Bloch.

Vemos, portanto, que a linearização da equação de Boltzmann e do termo de colisão é o único meio de que se dispõe para colocá-la numa forma bem mais simples que a forma íntegro-diferencial original.

Em geral, uma solução para a equação de Bloch não pode ser obtida de uma forma única. Existem dois métodos que podem ser

usados para resolvê-la. O primeiro deles foi proposto inicialmente por Kohler<sup>(1)</sup> e consiste em aplicar o princípio variacional a uma função tentativa. O segundo método, ao qual nos deteremos, consiste em definir um tempo de relaxação  $\tau$ . Seu significado físico é o de que, se uma função distribuição é determinada por um sistema de forças externas, as quais são repentinamente removidas, a taxa de aproximação do equilíbrio é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(f-f^0) = -\frac{f-f^0}{\tau} \quad (22)$$

ou ainda:

$$(f-f^0)_t = (f-f^0)_{t=0} e^{-t/\tau} \quad (23)$$

Os critérios de validade desta aproximação serão vistos no §4.

### § 3. Solução da equação de Bloch - Aproximação do tempo de relaxação

Vamos aqui nos deter na solução da equação de Bloch usando a aproximação do tempo de relaxação. Consideraremos o caso mais simples, isto é, para  $\vec{H} = 0$ , o que nos permitirá visualizar o caráter estacionário da função distribuição. Partindo da relação (22) e substituindo o lado esquerdo pela (13), obteremos:

$$e^{\vec{E}} \cdot \vec{v}_k \frac{\partial f^0}{\partial E} + \vec{v}_k \cdot \nabla T \frac{\partial f^0}{\partial T} = -\frac{f-f^0}{\tau} \quad (24)$$

É interessante aqui considerar duas situações. Primeiramente, suporemos  $\nabla T = 0$  e  $\vec{E} \neq 0$  e em segundo lugar tomaremos  $\vec{E} = 0$  e  $\nabla T \neq 0$ .

a) Para  $\nabla T = 0$  a relação (24) se reduz a:

$$e^{\vec{E}} \cdot \vec{v}_k \frac{\partial f^0}{\partial E} = -\frac{f-f^0}{\tau} \quad (25)$$

Escolhendo um sistema de coordenadas em que o campo elétrico  $\vec{E}$  esteja na direção do eixo  $x$ , podemos explicitar na expressão (25) a função distribuição na sua forma estacionária:

$$f = f^0 - \frac{e}{h} \tau \mathcal{E} \frac{\partial f^0}{\partial k_x} \quad (26)$$

onde se usou  $\vec{v}_k = \hbar^{-1} \nabla_k E$ .

A função distribuição estacionária está portanto, relacionada com a função distribuição de equilíbrio de uma forma bastante simples, isto é:

$$f(k_x, k_y, k_z) = f^0(k_x - \frac{e \mathcal{E} \tau}{h}, k_y, k_z) \quad (27)$$

A equação (27) mostra que a função distribuição  $f$  é idêntica à distribuição do equilíbrio  $f^0$ , exceto que a origem de  $f$  no espaço dos  $\vec{k}$  foi deslocada do ponto  $\vec{k} = (0, 0, 0)$  ao ponto  $\vec{k} = (e \hbar^{-1} \mathcal{E} \tau, 0, 0)$ . As distribuições de equilíbrio e estacionária para um fluxo de carga, são mostradas esquematicamente na figura 1, onde por conveniência se supõe que as superfícies de energia constante no espaço de  $\vec{k}$  são esferas e que o tempo de relaxação é uma função somente de energia, isto é, independente de direção. Na figura 1 (a) vemos as duas esferas de Fermi, uma centrada em  $k_x = 0$  e a outra em  $k_x = e \hbar^{-1} \mathcal{E} \tau$ . Em (b), indicou-se por uma linha cheia a distribuição de equilíbrio centrada em  $k_x = 0$  e por uma linha pontilhada a função deslocada.

O fato de que o campo elétrico simplesmente desloca a distribuição no espaço dos  $\vec{k}$  é compreensível tendo em vista o efeito do campo em cada estado quântico  $\vec{k}$ . Como sabemos, a força atuando no elétron é:  $\vec{F} = h \dot{\vec{k}}$  e portanto a taxa de variação de  $\vec{k}$  é a mesma para todos os elétrons. Consequentemente, se não existe nenhum mecanismo de relaxação que tende restabelecer a função distribuição ao equilíbrio, uma força  $e \vec{\mathcal{E}}$  conduzirá a função distribuição inalterada na sua forma através do espaço dos  $\vec{k}$ , com veloci-

dade constante  $\vec{k} = e\vec{E}/\hbar$ . Os mecanismos de relaxação que tendem a restabelecer a distribuição de equilíbrio, limitam esse deslocamento a  $\Delta\vec{k} = e\vec{E}\tau/\hbar$ .

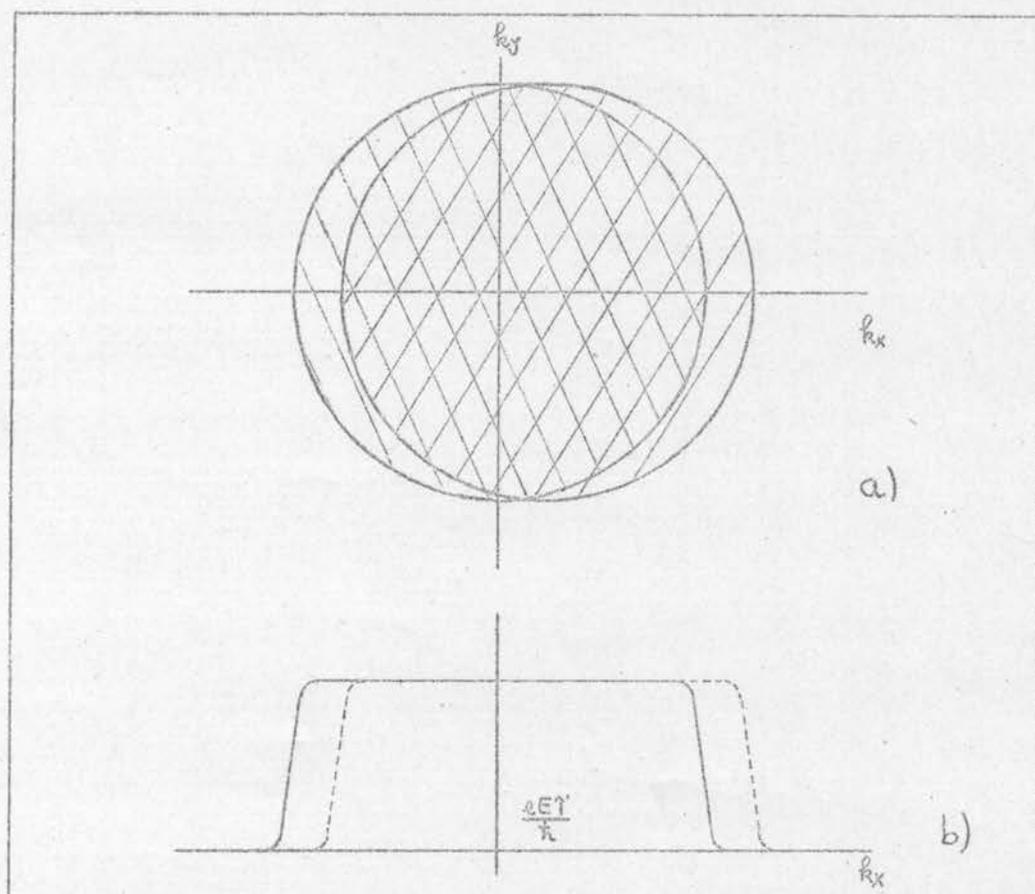


Fig. 1 - Distribuições de equilíbrio e estacionária para um fluxo de carga

b) Vamos considerar agora  $\vec{E} = 0$ .

Com a ajuda da relação:

$$\frac{\partial f^0}{\partial T} \nabla T = -\frac{\partial f^0}{\partial E} \left[ \nabla \mu + (E - \mu) \nabla \ln T \right] \quad (28)$$

e lembrando que no estado estacionário a energia de Fermi  $\mu$  é constante através do material, a relação (24) fica:

$$-\frac{\vec{v}}{k} \cdot \frac{\partial f^0}{\partial E} (E - \mu) \nabla \ln T = -\frac{f - f^0}{\tau} \quad (29)$$

Escolhendo a direção do gradiente de temperatura coincidente com o eixo dos  $x$ , obtemos para a função distribuição:

$$f = f^0 + \gamma(E - \mu) \frac{1}{T} \frac{\partial I}{\partial x} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial f^0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k_x} \quad (30)$$

Podemos simplificar a expressão acima, expandindo  $(E - \mu)$  em série de Taylor em torno da energia de Fermi  $\mu = \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$ . Desde que  $(E - \mu) \ll \mu$ , podemos substituir  $(E - \mu)$  por  $\hbar^2 k_F (k - k_F) / m^*$  e obtemos:

$$f = f^0 + \gamma \frac{\hbar k_F (k - k_F)}{m^* T} \frac{\partial I}{\partial x} \frac{\partial f^0}{\partial k_x} \quad (31)$$

Segue, então, que a distribuição no regime estacionário é dada por:

$$f(k_x, k_y, k_z) = f^0(k_x + \delta, k_y, k_z) \quad (32)$$

onde  $\delta = \gamma \frac{\hbar k_F (k - k_F)}{m^* T} \frac{\partial I}{\partial x}$ .

A equação (32) apresenta alguma similaridade com a (27), com a diferença de que no caso a) todas as superfícies de energia constante sofreram o mesmo deslocamento no espaço de  $\vec{k}$  e no presente caso, o deslocamento do centro de uma dada superfície de energia depende da energia desta superfície relativamente à energia de Fermi. Em particular, a distribuição de estados na superfície de Fermi  $\vec{k} = \vec{k}_F$ , não é influenciada pelo gradiente de temperatura; isto é  $\delta(k_F) = 0$ . Superfícies correspondendo a energias maiores que a energia de Fermi possuem seus centros deslocados no espaço de  $\vec{k}$  em direção oposta à direção do gradiente de temperatura, enquanto que superfícies de menor energia possuem seus centros deslocados na direção do gradiente de temperatura. A função distribuição resultante para o fluxo de calor é mostrada na figura 2. Na parte (a) da fig. 2 estão representadas as duas esferas de Fermi no espaço dos  $\vec{k}$ . Os círculos finos e pontilhados indicam a "largura"

da distribuição. Em (b) a linha cheia representa a distribuição de equilíbrio e a pontilhada a distribuição no regime estacionário.

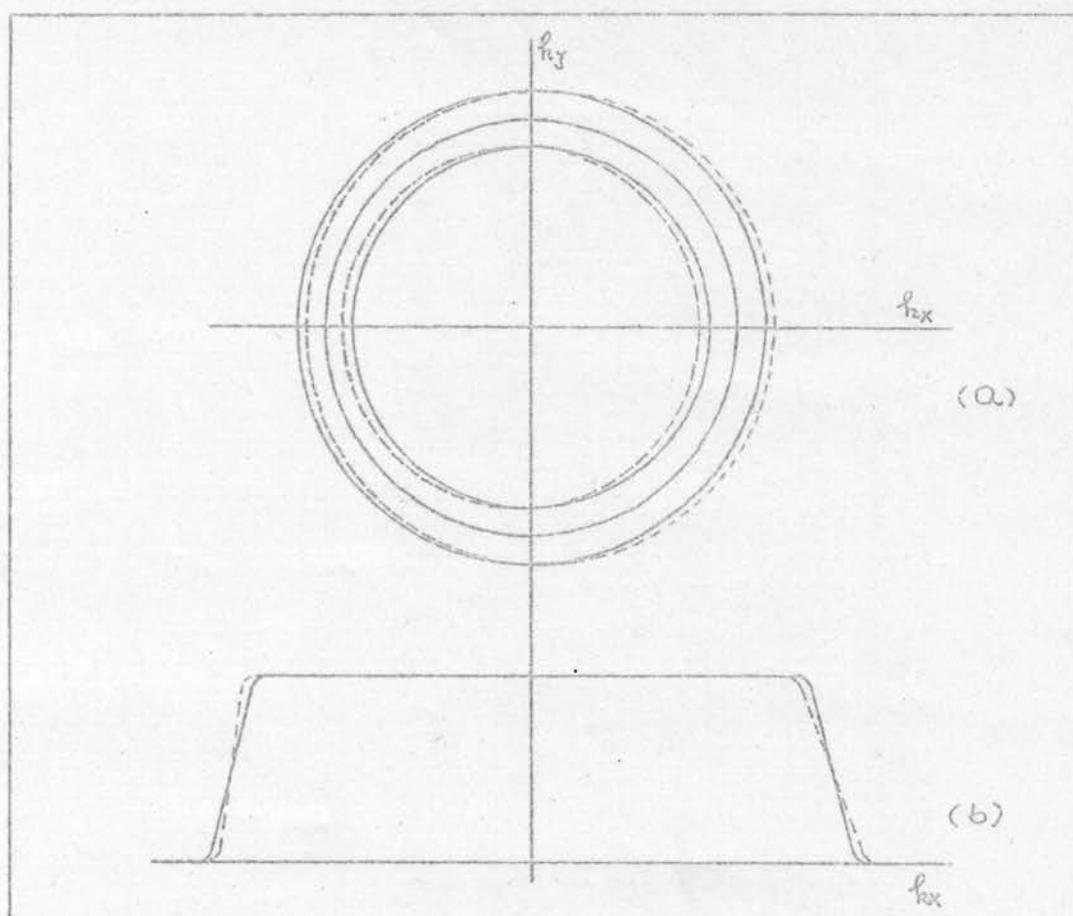


Fig. 2 - Distribuições de equilíbrio e estacionária para um fluxo de calor

Pelas figuras 1 e 2, é evidente que a forma da função de distribuição perturbada depende sensivelmente do caráter da perturbação. Consequentemente, a eficácia de um certo mecanismo de relaxação ao restabelecer estas duas distribuições ao equilíbrio pode também diferir acentuadamente. Neste caso, seria difícil definir um conveniente tempo de relaxação de aplicabilidade universal.

§ 4. Justificativa para a solução da equação de Bloch através de um tempo de relaxação

No parágrafo anterior, apresentamos as soluções da equação de Bloch para o caso em que  $\vec{H} = 0$ , baseadas na substituição da integral de colisão pela expressão  $(f - f^0)/\gamma$ . Vamos considerar agora a validade desta aproximação, a fim de que possamos saber quando a simplificação dela decorrente é de fato justificada.

É, realmente possível, definir um tempo de relaxação em qualquer circunstância. Tendo de alguma maneira resolvido a equação integral de Bloch e obtido uma expressão para  $\phi(\vec{k})$ , pode-se definir  $\gamma$  através da relação:

$$\gamma(\vec{k}) = \phi(\vec{k}) \frac{\partial f^0 / \partial E}{(\partial f / \partial t)_{col}} \quad (33)$$

Usando as relações (19) e (20), podemos escrever esta última de forma mais detalhada:

$$\frac{1}{\gamma(\vec{k})} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathcal{G}(\vec{k}, \vec{k}') \left[ \frac{1 - f^0(E')}{1 - f^0(E)} \right] \left[ \frac{1 - \phi(\vec{k}')}{\phi(\vec{k})} \right] d\vec{k}' \quad (34)$$

A equação (34) somente nos fornece um parâmetro útil e com significado físico se ele for característico do espécime e independente do tipo e intensidade da perturbação responsável pelo afastamento da função distribuição de seu valor de equilíbrio. Em outras palavras, a tendência ao estado de equilíbrio deve ser exponencial, governada pela mesma constante de tempo, não interessando se é da forma mostrada na figura 1 ou 2.

- Vamos considerar, primeiramente, processos de espalhamento elástico. Com esta restrição  $\mathcal{G}(\vec{k}, \vec{k}')$  se anula sempre que  $E(\vec{k}) \neq E(\vec{k}')$ . Além disso podemos fazer  $f^0(E) = f^0(E')$  no integrando da (34) e obter:

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathcal{G}(\vec{k}, \vec{k}') \left[ 1 - \frac{\phi(\vec{k})}{\phi(\vec{k}')} \right] d\vec{k}' \quad (35)$$

Nós assumimos que  $\mathcal{G}(\vec{k}, \vec{k}')$  possui o mesmo valor tanto no estado estacionário quanto no de equilíbrio, e resta ver se a razão  $\phi(\vec{k}')/\phi(\vec{k})$  é independente da perturbação. No caso em que somente um campo elétrico  $\vec{\mathcal{E}} = (\mathcal{E}, 0, 0)$  está atuando, a razão acima é dada pela (25):

$$\frac{\phi(\vec{k}')}{\phi(\vec{k})} = \frac{e\tau(\vec{k}')\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{v}_x(\vec{k}')}{e\tau(\vec{k})\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{v}_x(\vec{k})} = \frac{\tau(\vec{k}')v_x(\vec{k}')}{\tau(\vec{k})v_x(\vec{k})} \quad (36)$$

onde  $v_x(\vec{k})$  descreve a componente x da velocidade de um elétron no estado quântico  $\vec{k}$ .

Se, por outro lado  $\vec{\mathcal{E}} = 0$  e somente um gradiente de temperatura  $\nabla T = (\partial T/\partial x, 0, 0)$  perturba o equilíbrio, a razão é dada por:

$$\frac{\phi(\vec{k}')}{\phi(\vec{k})} = \frac{\tau(\vec{k}')v_x(\vec{k}')}{\tau(\vec{k})v_x(\vec{k})} \cdot \left[ \frac{E(\vec{k}') - \mu}{E(\vec{k}) - \mu} \right] \quad (37)$$

As expressões (36) e (37) são independentes de  $\vec{\mathcal{E}}$  e  $\nabla T$  e só serão iguais no caso de espalhamento elástico quando então  $E(\vec{k}) = E(\vec{k}')$ . Concluímos que no limite de espalhamentos elásticos um tempo de relaxação único fica perfeitamente definido.

— Em segundo lugar, se os espalhamentos forem inelásticos, o tempo de relaxação definido pela (34) dependerá das magnitudes de  $e\vec{\mathcal{E}}$  e  $(E - \mu)\nabla \ln T$ , e um único tempo de relaxação descritivo da resistividade elétrica e térmica não pode ser definido.

Neste caso, o tempo de relaxação só terá significado:

- a) quando um dos dois efeitos for nulo, isto é,  $\vec{\mathcal{E}} = 0$  ou  $\nabla T = 0$ .
- b) ou para as colisões inelásticas em que a variação de energia sofrida pelo elétron por colisão é suficientemente pequena, is-

to é, sempre que  $\Delta E < k_B T$ . (colisões quase-elásticas).

Esta última condição decorre da integral de colisão (20). Através dela, vemos que o integrando será de uma magnitude significativa somente na região em que  $E < \mu + k_B T$  e  $E' > \mu - k_B T$ , pois de outro modo o fator  $f(E)(1-f(E'))$  tende a zero. Se  $|E(\vec{k}') - E(\vec{k})| < k_B T$  a razão  $[E(\vec{k}') - \mu] / [E(\vec{k}) - \mu]$  que aparece na (37) será próxima de um, quando feita a média sobre  $\vec{k}$ . De outro lado, se  $|E(\vec{k}') - E(\vec{k})| > k_B T$ , a média das equações (36) e (37) serão bastante diferentes.

Vamos investigar sob que condições as colisões inelásticas em um metal obedecem à relação  $\Delta E < k_B T$ . Por exemplo, quando um elétron com vetor de onda  $\vec{k}$  é espalhado por um fonon em um estado  $\vec{k}'$ , o elétron pode tanto absorver como emitir um fonon de vetor de onda  $\vec{q}$ , e tal que:

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (38)$$

Neste processo, o elétron ganha ou perde um quantum de energia  $\hbar\omega_q$ , e a conservação de energia do sistema como um todo impõe que:

$$E' = E \pm \hbar\omega_q \quad (39)$$

Vetores de onda de fonons possuem magnitudes que variam de  $q = 0$  a  $q_0 = k_B \Theta_D / \hbar u$ , onde  $\Theta_D$  é a temperatura de Debye e  $u$  é a velocidade do som no sólido. Em metais, o vetor de onda  $q_0$  possui a mesma ordem de grandeza que o vetor de onda de Fermi.

Por outro lado, a energia de Fermi é da ordem de 5 eV, enquanto a máxima energia do fonon,  $k_B \Theta_D$ , é da ordem de 1/40 eV para a maioria dos metais. Assim, absorção ou emissão de fonons pode ocasionar uma expressiva variação na direção do momentum eletrônico ( $|\vec{k}' - \vec{k}|$  em geral é da mesma ordem de grandeza que  $k_F$ ), mas a variação na energia não pode ser maior que  $k_B \Theta_D$ , a qual representa um incremento na energia muito pequeno comparado com a energia de Fermi  $\mu$ . Vimos acima que um processo de espalhamento

pode ser considerado quase-elástico somente se a variação de energia na colisão é pequena comparada a  $k_B T$ . Aplicando este critério à presente situação, concluímos que este mecanismo de relaxação é quase-elástico somente a altas temperaturas, quando  $k_B T > k_B \Theta_D$ .

A temperaturas abaixo de  $\Theta_D$ , a energia de fonon é comparável a  $k_B T$  e conseqüentemente, o espalhamento elétron fonon é inelástico. Além disso, a baixas temperaturas,  $T \ll \Theta_D$ , fonons de energia  $\hbar \omega_q \approx k_B T \ll k_B \Theta_D$  e com vetor de onda  $q \ll q_0$  dominam o espectro vibracional para a maioria dos metais (exceto para os metais de transição como veremos no capítulo II). Conseqüentemente, a baixas temperaturas  $k_F \gg q$  e os elétrons são espalhados a ângulos pequenos.

Na figura 3 estão indicados esquematicamente os dois processos de espalhamento para os dois extremos da variação de  $T$ .

O processo de espalhamento elétron-fonon a ângulos grandes, representado na figura 3 a) é um processo quase-elástico e portanto para este processo é válida a utilização de um tempo de relaxação.

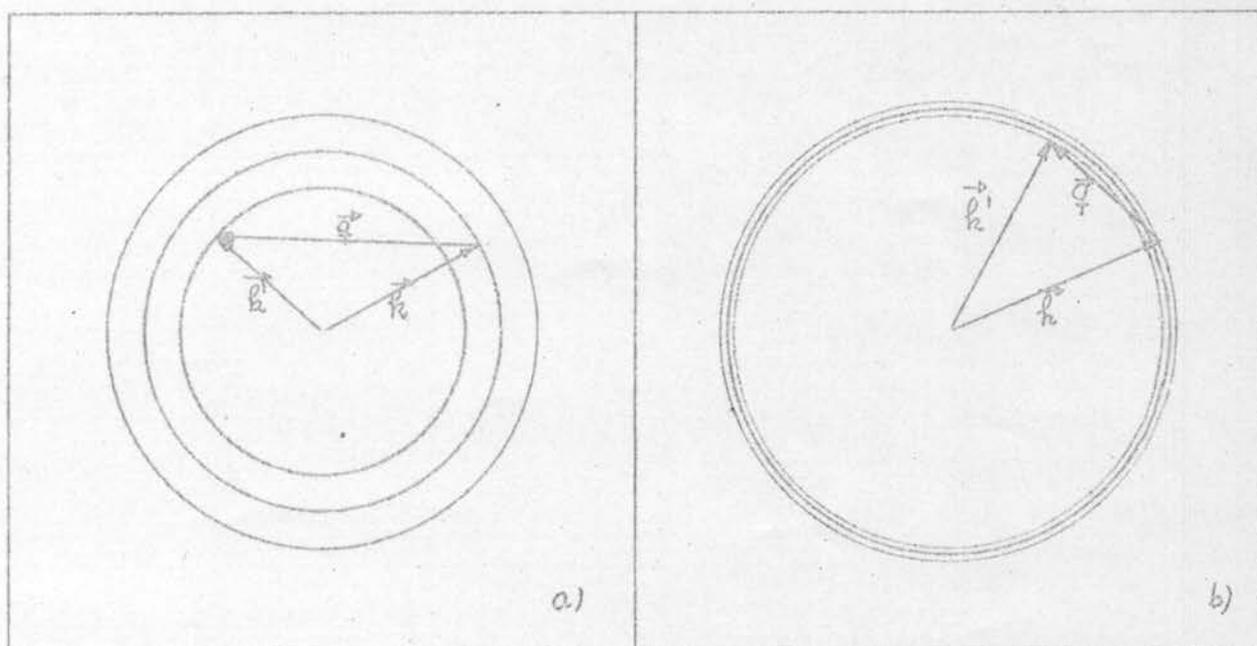


Fig. 3 - Espalhamentos elétron-fonon

O espalhamento elétron-fonon a ângulos pequenos, representado na figura 3 b) é um processo inelástico, no sentido de que a variação de energia é da ordem de  $k_B T$ . Para esses processos inelásticos que ocorrem a baixas temperaturas a aproximação do tempo de relaxação só é válida se fizermos uso da condição a), isto é, se estudarmos o comportamento da função distribuição em um espécime sujeito a um campo elétrico, mas na ausência de gradientes de temperatura ou vice-versa.

Com essa descrição acima, procuramos justificar a utilização do tempo de relaxação nos cálculos que apresentaremos no capítulo IV.

#### § 5. Expressão para a condutividade elétrica na aproximação do tempo de relaxação

Como sabemos, a condutividade elétrica é dada pela lei de Ohm pela expressão

$$\sigma = \frac{\vec{J}}{e|\vec{C}|} \quad (40)$$

onde  $\vec{J}$  é a densidade de corrente definida pela relação (2) e  $\vec{C}$  é o campo elétrico.

Substituindo na relação (2) a relação (10) e levando em conta que no estado de equilíbrio não há fluxo resultante de corrente, a densidade de corrente fica:

$$\vec{J} = \frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v}_k f^1 d\vec{k} \quad (41)$$

Na ausência de campo magnético e de gradientes de temperatura a expressão para  $f^1$  é obtida das relações (10) e (25) e a (41) fica:

$$\begin{aligned} \vec{J} &= -\frac{e^2 \vec{E}}{4\pi^3} \int \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f^0}{\partial E} d\vec{k} = \\ &= -\frac{e^2 \vec{E}}{12\pi^3} \iiint \tau v^2 \frac{dS}{|\nabla_{\vec{k}} E|} \frac{\partial f^0}{\partial E} dE \end{aligned} \quad (42)$$

Para superfícies de energia esféricas, a densidade de corrente resulta:

$$\vec{J} = -e^2 \vec{E} \frac{4}{3m^*} \int \mathcal{N}(E) \tau(E) E \frac{\partial f^0}{\partial E} dE \quad (43)$$

onde  $\mathcal{N}(E)$  é a densidade de estados e  $m^*$  a massa efetiva.

No limite de baixas temperaturas,  $-\partial f^0/\partial E$  é zero exceto para  $E = \mu$ , isto é:

$$-\frac{\partial f^0}{\partial E} \longrightarrow \delta(E - \mu) \quad (44)$$

e assim a expressão para  $\sigma$  se reduz a:

$$\sigma = \frac{e^2 n_0 \tau}{m^*} \quad (45)$$

onde  $n_0$  é o número de elétrons por unidade de volume.

A resistividade elétrica, sendo o inverso da condutividade, é dada por:

$$\rho = \frac{m^*}{n_0 e^2} \frac{1}{\tau} \quad (46)$$

## § 6. Regra de Mathiessen

Frequentemente, precisamos calcular a resistividade de um metal onde diferentes processos de espalhamento ocorrem simultaneamente, por exemplo quando elétrons são espalhados tanto por fônons como por impurezas. Um argumento pouco rigoroso, sugere que a resistividade resultante é a soma das resistividades devido a ca

da tipo de espalhamento tomadas separadamente. Isto nos conduz à regra de Mathiessen, a qual expressa a idéia de que a resistividade elétrica pode ser considerada como a soma de duas partes independentes, uma delas é uma função da pureza do metal e a outra uma função da temperatura do metal puro, isto é:

$$\rho_M(T) = \rho(0) + \rho(T) \quad (17)$$

A adição de impurazas a um metal segundo a regra de Mathiessen, desloca a curva de  $\rho(T)$  mas não altera sua forma. Tal comportamento é mostrado na figura 4. Na prática, para a maioria dos metais simples, essa regra é obedecida, no entanto verificam-se alguns desvios que se tornam bastante significativos para os metais de transição, como veremos no capítulo III.

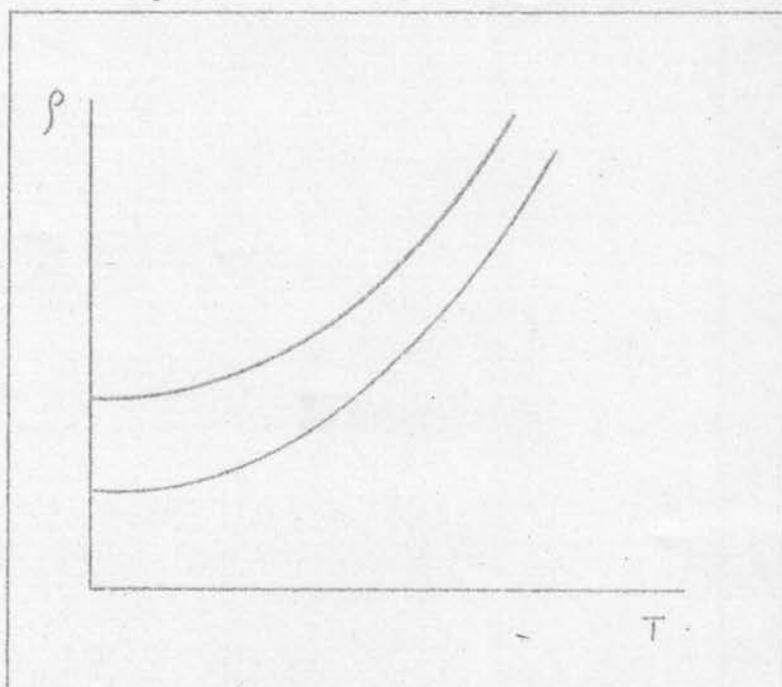


Fig. 4 - Regra de Mathiessen

## II - CONDUTIVIDADE DOS METAIS DE TRANSIÇÃO

## §1. Considerações gerais

A condução elétrica é uma das mais importantes propriedades e ao mesmo tempo uma das mais complexas, uma vez que depende não somente da estrutura eletrônica do metal mas também dos mecanismos de relaxação dos elétrons de condução.

O estudo da condutividade elétrica dos metais em geral, tem recebido considerável interesse. Em particular, para os metais de transição dos grupos 3d e 4f e suas ligas muita literatura tem sido publicada nesta área<sup>(2), (3)</sup>.

O comportamento elétrico dos metais de transição revela uma variedade de peculiaridades que parecem estar intimamente relacionadas com suas propriedades magnéticas. Em primeiro lugar, a dependência da resistividade com a temperatura difere significativamente dos demais metais. Assim, nos metais de transição ferromagnéticos, abaixo da temperatura de Curie  $\theta_c$ , a resistividade aumenta rapidamente. Logo acima de  $\theta_c$ ,  $d\rho/dT$  é aproximadamente constante, e uma extrapolação da curva para  $T = 0^\circ K$  não intercepta o eixo de  $\rho(T)$  em  $\rho \approx 0$  como nos metais normais. Um exemplo deste comportamento nos é dado pelo níquel na figura 1. Estas observações sugerem uma resistência adicional associada com o decréscimo na magnetização espontânea conforme  $T$  se aproxima de  $T_c$ .

Nos metais de transição não ferromagnéticos, tais como Pd e Pt, naturalmente não existe uma descontinuidade em  $d\rho/dT$  tal como existe no níquel, contudo a resistividade é bem maior do que nos demais

RESISTIVIDADE

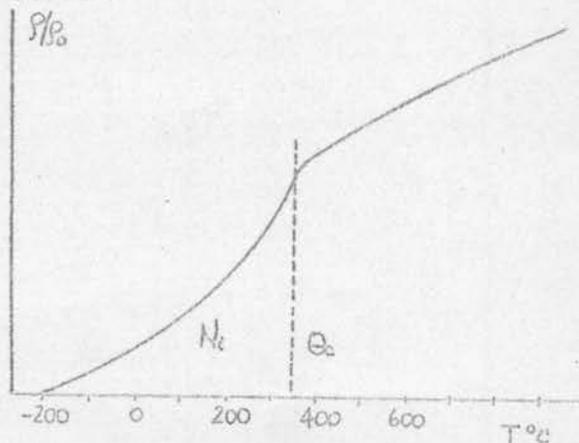


Fig.1 - Resistividade elétrica do níquel como função da temperatura.

metais com um número comparável de elétrons de condução.

Por outro lado, a resistividade ideal, isto é, a parte da resistividade depende da temperatura, tanto nos metais de transição ferromagnéticos como nos não ferromagnéticos se desvia da lei de Bloch-Gruneisen a baixas temperaturas. Segundo esta lei, a baixas temperaturas  $\rho(T)$  é proporcional a  $T^5$ , correspondendo à espalhamentos elétron-fonon. No entanto, para os metais de transição do grupo do Fe este comportamento é substituído aproximadamente por  $T^2$  e para o grupo dos terras raras por  $T^2$  e  $T^4$  (2), (3).

Para explicar estas e outras características dos metais de transição muitos modelos tem sido usados. Na realidade, esses modelos são, em geral derivados através de pequenas alterações de dois modelos originais que passaremos a descrever a seguir.

## §2. Modelos para os elétrons de condução

A primeira tentativa neste sentido foi dada por Mott (4), (5) o qual baseou sua teoria no modelo itinerante, ou de banda para os elétrons d, em contraste com a teoria de Heisenberg do ferromagnetismo, na qual estes elétrons são supostos localizados nos íons magnéticos.

Segundo Mott, nos metais de transição do grupo 3d, deve-se considerar duas bandas de energia, isto é, uma banda s de largura normal e uma banda d muito estreita e com uma grande densidade de estados. Por outro lado, devido à grande massa efetiva dos elétrons d, sua contribuição à condutividade é pequena e pode ser desprezada quando comparada com a massa efetiva dos elétrons s. Contudo considerou que os níveis vacantes na banda d possuem um considerável efeito sobre a condutividade dos elétrons. Sob a influência de vibrações de rede, de impurezas ou mesmo devido a colisões elétron-elétron, um elétron s pode ser espalhado não somente nos níveis de energia de banda s (transições s-s) como também nos níveis de energia da banda d (transições s-d).

Veremos no parágrafo seguinte, que esse modelo se adapta tanto aos metais de transição do grupo 3d como aos metais terras raras.

### § 3. Interação de troca s-d

Os metais ferromagnéticos e ligas dos elementos de transição do grupo 3d, tais como ferro, cobalto e níquel estão entre os materiais que tem sido mais extensivamente estudados tanto experimentalmente como teoricamente. Contudo, a origem do ferromagnetismo não está ainda totalmente clara. Sabe-se que a maior parte dos momentos magnéticos origina-se nos elétrons 3d. Muitos modelos diferentes foram propostos para explicar o mecanismo de alinhamento dos elétrons 3d. O primeiro deles foi baseado no modelo de Heitler-London supondo os elétrons d localizados e em uma interação de troca d-d, do tipo de Heisenberg. Contudo, essa interação daria origem a um alinhamento antiferromagnético em contraste com a observação. Uma outra tentativa, baseada no modelo de banda para os elétrons 3d foi apresentada por Stoner. Como se observa, são dois tratamentos totalmente opostos. Um modelo real deveria levar em conta os dois efeitos, o que o tornaria bastante complicado. Por outro lado, uma terceira hipótese para o alinhamento dos elétrons 3d foi levantada por Zener<sup>(6)</sup>. É diferente das duas anteriores no fato de que, em vez de uma interação d-d, foi proposta uma interação de troca entre os elétrons 3d e os elétrons de condução, os quais são em sua maior parte de caráter 4s. Este modelo é chamado "modelo de interação s-d".

Para tratar a interação de troca s-d, Zener propôs a seguinte forma simplificada:

$$J_{s-d} = \frac{J(0)}{N} \langle S_z \rangle \langle \sigma_z \rangle \quad (1)$$

Como a probabilidade de transição é proporcional à densidade de níveis de energia no estado final e, uma vez que esta densidade é grande para os níveis  $d$ , as transições  $s-d$  darão origem a uma probabilidade de espalhamento muito maior que a normal. Consequentemente, o modelo previsto por Mott para os metais de transição do grupo  $3d$ , assume uma corrente de condução que é devido principalmente aos elétrons  $s$  e uma resistência devido às transições  $s-d$ .

A teoria de Mott a despeito de seu sucesso, é deficiente em alguns aspectos. Nesse modelo de duas bandas, as superfícies de Fermi das bandas  $s$  e  $d$  não se interceptam. Então, será necessário um valor mínimo do momentum para que ocorra uma transição  $s-d$ , abaixo de uma certa temperatura  $T^*$ . É de se esperar, neste caso, o aparecimento de um fator exponencial na resistividade:

$$\rho(T) \propto \exp\left(-\frac{T^*}{T}\right)$$

o que não é verificado experimentalmente.

Naturalmente, as superfícies de Fermi não são esféricas e um contato entre elas é bastante possível. Neste caso, contudo,  $\rho(T)$  deve variar aproximadamente com  $T^5$  em contraste com a variação com  $T^2$  observada a baixas temperaturas.

Por outro lado, nos metais terras raras, a camada  $4f$  não constitui uma banda, mas se comporta como se fosse constituída de elétrons bem localizados. Então, o processo de transição entre bandas, descrito acima, não ocorre. Contudo, também os metais terras raras não obedecem à lei de Bloch-Grüneisen, a baixas temperaturas.

Uma explicação alternativa para a condução nos metais de transição ferromagnéticos, é baseada no modelo de Heisenberg, segundo a qual os elétrons  $d$  não formam uma banda; uma discussão em termos de transições  $s-d$  não mais é possível.

Dentro desse modelo, a resistividade é uma consequência do espalhamento de elétrons  $s$  por spins localizados através do mecanismo de interação de troca  $s-d$ .

onde  $J(0)$  é a integral de troca s-d,  $\langle S_z \rangle$  e  $\langle \sigma_z \rangle$  são as polarizações de spin dos elétrons d e s respectivamente e  $N$  é o número de íons magnéticos. Contudo, esse tratamento é puramente fenomenológico e em muitos pontos insatisfatório porque a teoria não envolve antiferromagnetismo ou excitações de ondas de spins.

Esse modelo foi considerado em uma base mais rigorosa por Kasuya<sup>(7)</sup>. No modelo de interação de troca s-d, proposto por Kasuya a interação de troca d-d é considerada pequena. Isso parece razoável desde que a sobreposição das funções de onda dos elétrons d em diferentes sítios seja pequena, o que implica serem os elétrons d localizados.

Neste sentido, a situação é muito mais simples nos metais terras raras porque os elétrons 4f, os quais são os responsáveis pelos momentos magnéticos nesses metais, são cercados por elétrons 5s e 5p e portanto situados dentro do íon. O modelo de troca s-f aplicado a esses metais parece ter uma base mais sólida do que o modelo s-d no caso dos metais de transição 3d.

No caso mais simples, a interação de troca s-d ou s-f foi derivada por Kasuya da seguinte maneira. Considera-se em primeiro lugar, um átomo de terra rara. A interação de troca entre um elétron de condução\* com spin  $\sigma$  e um elétron 4f com spin  $S$ , pode ser escrita no modelo de Hartree como

$$\mathcal{H}_{ex} = J_n \vec{S}_m \cdot \vec{\sigma}_m \quad (2)$$

onde o índice  $n$  se refere às posições da rede e  $J_n$  é a integral de troca dada na sua forma usual por:

---

\* Nas terras raras, os elétrons 5d, embora tendo caráter localizado, formam uma banda larga podendo-se supor que os elétrons de condução são constituídos de elétrons 6s e 5d. Contudo, originalmente apenas os elétrons 6s foram considerados.

$$J_m = - \left\langle \psi_c(1) \psi_{4f}(2) \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_c(2) \psi_{4f}(1) \right\rangle \quad (3)$$

Assume-se que as funções de onda dos elétrons de condução, indicadas com um índice  $c$ , são dadas na aproximação "tight binding" e que a sobreposição entre essas e as funções  $4f$  é pequena. Os operadores criação e aniquilação para os elétrons de condução no estado de vetor de onda  $\vec{k}$  de spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$  são escritos em termos dos operadores dos estados atômicos como:

$$a_{c,k\uparrow\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_m) a_{c,m\uparrow\downarrow} \quad (4)$$

Usando as identidades:

$$\sigma_{c,m}^z = a_{c,m\uparrow}^* a_{c,m\uparrow} - a_{c,m\downarrow} a_{c,m\downarrow}^*$$

$$\sigma_{c,m\uparrow\downarrow} = a_{c,m\uparrow\downarrow}^* a_{c,m\uparrow\downarrow} \quad (5)$$

a interação s-f de Kasuya fica:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{s-f} &= \sum_m J_m \vec{\sigma}_{c,m} \cdot \vec{S}_m = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{m, \vec{k}, \vec{k}'} J_m(\vec{k}, \vec{k}') e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}_m} \left[ S_m (a_{c,k'\uparrow}^* a_{c,k\uparrow} - \right. \\ &\quad \left. - a_{c,k\downarrow}^* a_{c,k'\downarrow}) + S_m^+ a_{c,k'\downarrow}^* a_{c,k\uparrow} + S_m^- a_{c,k'\uparrow}^* a_{c,k\downarrow} \right] \quad (6) \end{aligned}$$

Pela relação (3) é possível mostrar que  $J_n(\vec{k}, \vec{k}')$  não depende de  $\vec{R}_n$  e que depende sensivelmente de  $\vec{k}' - \vec{k}$ . Portanto, assume-se

$$J(\vec{k}, \vec{k}') \approx J(\vec{k}' - \vec{k}) \quad (7)$$

Nos metais de transição 3d, o hamiltoniano de interação é obtido de maneira análoga à relação (6). Assim, usando a aproximação dada pela relação (7) podemos escrever o hamiltoniano de interação s-d ou s-f como:

$$H_{s-d} \approx \frac{1}{N} \sum_{m, \vec{k}, \vec{k}'} J(\vec{k}' - \vec{k}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}_m} \left[ S_m^z (a_{\vec{k}'\uparrow}^* a_{\vec{k}\uparrow} - a_{\vec{k}'\downarrow}^* a_{\vec{k}\downarrow}) + S_m^+ a_{\vec{k}'\downarrow}^* a_{\vec{k}\uparrow} + S_m^- a_{\vec{k}'\uparrow}^* a_{\vec{k}\downarrow} \right] \quad (8)$$

conhecido por hamiltoniano de Kasuya.

Foi, também Kasuya<sup>(8)</sup> quem pela primeira vez usou o modelo de interação de troca s-d para interpretar qualitativamente a resistividade elétrica dos metais ferromagnéticos. Considerou que os elétrons s carregavam corrente e eram aproximadamente livres enquanto que os elétrons da camada interna incompleta (elétrons d nos metais de transição e elétrons f nos metais terras raras) não carregavam corrente, sendo aproximadamente localizados.

No capítulo IV, voltaremos a abordar o hamiltoniano de Kasuya, quando então o usaremos no cálculo da resistividade elétrica de metais magnéticos.

#### § 4. Processos de espalhamento

Os processos de espalhamento responsáveis pela resistividade elétrica de um metal, em geral, são:

- a) Espalhamento elétron fonon
- b) Espalhamento de elétrons por impurezas ou defeitos
- c) Espalhamento elétron-elétron
- d) Espalhamento elétron-magnon

Para os metais de transição do grupo 3d e 4f, os dois últimos processos são particularmente importantes e passaremos a descrevê-los.

--Primeiramente, discutiremos a influência da interação elétron-elétron na resistividade.

A interação eletrostática entre elétrons de condução em um metal é descrita por um potencial Coulombiano blindado do tipo  $\frac{e}{r} \exp(-qr)$ , sendo  $q^{-1}$  o raio da blindagem.

De acordo com o princípio de Pauli, o espalhamento de dois elétrons nos estados  $\vec{k}_1$  e  $\vec{k}_2$  para os estados  $\vec{k}'_1$  e  $\vec{k}'_2$  só pode ocorrer se ambos os estados finais não estiverem ocupados. Além disso, os estados iniciais e finais devem estar contidos dentro de um intervalo de energia de largura  $k_B T$  em torno da superfície de Fermi. Devido a essa dupla aplicação do princípio de exclusão, a probabilidade de colisão intereletrônica contém um fator  $(k_B T / \mu)^2$ , determinando assim a dependência com  $T^2$  da resistividade de  $\rho_{ee}(T)$ .

Teoricamente, o espalhamento elétron-elétron foi discutido inicialmente por Baber<sup>(9)</sup> e mais tarde por Ziman<sup>(1)</sup> e Appel<sup>(10)</sup>. Os autores usaram um modelo de duas bandas, supostas parabólicas, com os elétrons s e d possuindo massas efetivas diferentes ( $m_s \ll m_d$ ). Mostraram que as colisões entre os elétrons s de condução com os elétrons d com velocidade  $v_d \ll v_s$  acarretam um conside

rível efeito na resistividade originando uma dependência com  $T^2$ . É necessário salientar aqui, que este mecanismo de espalhamento não é compatível com um modelo em que os elétrons d estejam localizados, pois nesse caso não haveria colisão entre elétrons s e d, exatamente para uma interação do tipo desordem de spin, a qual não é possível em metais ordenados ferromagneticamente a baixas temperaturas.

Experimentalmente, uma dependência com  $T^2$  da resistividade elétrica para  $T \ll \Theta_D$  foi observada pela primeira vez em Pt em 1933. Mais tarde, dependências análogas foram encontradas nos demais metais de transição, inclusive nos ferromagnéticos Fe, Co e Ni. Para estes, contudo, o mecanismo de espalhamento que origina uma dependência com  $T^2$  é de natureza diferente e será discutido posteriormente.

Portanto, os dados experimentais disponíveis sobre a resistividade elétrica dos metais de transição nos permitem concluir que a parte da resistividade dependente da temperatura dos metais não ferromagnéticos a baixas temperaturas é devido principalmente a espalhamento elétron-elétron. Na temperatura de hélio líquido, a resistividade devido a colisões elétron-elétron  $\rho_{ee}(T)$  é muitas vezes maior do que a resistividade devido a espalhamento elétron-fonon  $\rho_{ef}(T)$ . Assim, por exemplo, em  $T = 4.2^\circ\text{K}$ , a razão  $\rho_{ee}(T)/\rho_{ef}(T)$  é igual a 30 para tungstênio, 60 para molibdênio, 59 para osmio e 130 para rutênio e platina.

É difícil tirar conclusões sobre a origem exata de  $\rho_{ee}(T)$  nos metais de transição não ferromagnéticos; pode haver contribuições para  $\rho_{ee}(T)$  de colisões entre grupos de portadores com diferentes massas efetivas e diferentes velocidades de Fermi, como também pode ocorrer colisões intereletrônicas acompanhadas por processos unklapp.

### Espalhamento por ondas de spin

Metais de transição com ordem magnética possuem algumas particularidades nas suas propriedades cinéticas. As excitações térmicas no sistema de momentos magnéticos atômicos (ondas de spin) ocasionam o aparecimento de mecanismos de espalhamento adicionais para os elétrons de condução.

Os processos de colisões de elétrons  $s$  e magnons a temperaturas  $T \ll \Theta_c$  ( $\Theta_c$  temperatura de Curie) foram pela primeira vez investigados por Vonsovskii em 1948 com base no modelo de Zener. A interação entre os elétrons  $s$  e os magnons ocorre via criação e destruição de ondas de spin. Nesses processos, a lei de conservação do momentum foi considerada satisfeita, isto é:

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q}$$

onde  $\vec{k}'$  e  $\vec{k}$  são os momentos dos elétrons  $s$  antes e depois da colisão e  $\vec{q}$  é o momentum do magnon.

O cálculo do espectro de energia nos metais ferromagnéticos e das probabilidades de transição executados por Vonsovskii em 1955, permitiram a Turov, no mesmo ano, desenvolver uma teoria da resistividade elétrica dos metais ferromagnéticos a baixas temperaturas. O resultado qualitativo obtido para  $\rho_{em}(T)$  devido ao espalhamento elétron-magnon mostra um comportamento com  $T^2$ .

A dependência da resistividade elétrica com a temperatura nos metais ferromagnéticos Fe, Co e Ni foi estudada experimentalmente por muitos investigadores. White e Woods<sup>(11)</sup> encontraram para esses metais, a temperaturas abaixo de  $10^0\text{K}$  um comportamento do tipo  $\rho(T) \sim a T^2$ , com o coeficiente  $a$  da ordem de  $10^{-12} \Omega \text{ cm } ^\circ\text{K}^{-2}$ . Esses resultados foram comprovados em uma série de experiências realizadas posteriormente.

Nessas experiências, a maior dificuldade consiste em isolar as contribuições para a resistividade elétrica das colisões elétron-elétron e elétron-magnon. Em geral, o que se faz pa-

ra separar na resistividade as partes dependentes de temperatura, é assumir que os vários mecanismos de espalhamento dão contribuições aditivas à resistividade total, isto é:

$$\rho(T) = \rho(0) + \rho_{ee}(T) + \rho_{em}(T) + \rho_{ef}(T)$$

onde  $\rho(0)$  é a resistividade residual,  $\rho_{ee}(T)$  resistividade associada com colisões elétron-elétron,  $\rho_{em}(T)$  e  $\rho_{ef}(T)$  são as resistividades associadas com o espalhamento de elétrons por magnons e fonons respectivamente.

Afim de determinar a dependência de  $\rho_{em}(T)$  com a temperatura sem postular a forma desta função, é necessário separar  $\rho_{ee}(T)$  e  $\rho_{ef}(T)$  da resistividade ideal  $\rho_i(T) = \rho(T) - \rho(0)$ . Uma das possíveis maneiras de separar  $\rho_{ee}(T)$  e  $\rho_{ef}(T)$  é usar dados de dependência de temperatura de um metal que possua uma estrutura eletrônica similar.

Para os metais terras raras, ordenados magneticamente, o valor observado para  $\rho_{em}(T)$  é extraordinariamente grande, excedendo por várias vezes o valor da contribuição devido a colisões elétron-elétron e por mais que uma ordem de grandeza o valor da contribuição devido ao espalhamento elétron-fonon.

Por outro lado, como o caráter da dependência com a temperatura para  $\rho_{em}(T)$  é determinado pelas peculiaridades do espectro de energia para os magnons, é possível através de um modelo teórico e do comportamento experimental obter informações sobre o tipo de lei de dispersão para as ondas de spin.

Descreveremos no capítulo seguinte um modelo para a condução em metais ferromagnéticos. Com base nesse modelo comprovam-se os resultados experimentais a respeito da importância dos espalhamentos de elétrons por ondas de spin.

## III - MODELO DE DUAS CORRENTES

## § 1. Origens do modelo

Weiss e Marotta<sup>(12)</sup> em 1959 e Mott<sup>(5)</sup> em 1964, sugeriram que algumas anomalias na resistividade dos metais ferromagnéticos poderiam ser explicadas por um modelo no qual os elétrons com spin positivo e negativo "carregavam corrente em paralelo".

Em 1967, Campbell et al.<sup>(13)</sup> fizeram algumas medidas de resistividade em ligas de ferro contendo impurezas diluídas, e mostraram que a interpretação acima, realmente poderia estar ocorrendo. O critério usado pelos autores, para interpretar os resultados experimentais, consistiu em comparar as resistividades com aquelas que seriam esperadas se a regra de Mathiessen (rel. I-47) fosse obedecida.

Em termos dos desvios da regra de Mathiessen,  $\Delta\rho(T) = \rho(T) - \rho_{\text{exp}}(T)$  para as diversas ligas binárias de Fe, foi possível classificar os resultados da seguinte forma:

- a) As amostras de Fe que continham impurezas de metais de transição, apresentavam desvios a  $T = 293^{\circ}\text{K}$  que variavam entre 1.3 - 6.4  $\mu\Omega\text{ cm}$ , valores esses comparáveis com a resistividade do Fe puro a essa temperatura e maiores que a resistividade residual.
- b) Para as ligas de Fe com metais não pertencentes ao grupo dos metais de transição (Si e Al), os desvios a  $T = 293^{\circ}\text{K}$  eram pequenos, da ordem de 0,1  $\mu\Omega\text{ cm}$ .
- c) Medidas em algumas amostras com impurezas de metais de transição num intervalo de  $4^{\circ}\text{K}$  a  $70^{\circ}\text{K}$  mostram que o desvio  $\Delta\rho(T)$  é aproximadamente proporcional a  $T^2$ .

Campbell, Fert e Pomerooy<sup>(13)</sup> sugeriram que estes resultados poderiam ser entendidos no seguinte modelo de "duas correntes". Os elétrons de condução na liga estão divididos em duas bandas de spins com direções opostas, de tal modo que a muito baixas tempera

turas os elétrons com spins  $\uparrow$  e spin  $\downarrow$  conduzem independentemente e em paralelo. A introdução de uma impureza ocasiona o aparecimento de resistividades residuais  $\rho_{\uparrow}(0)$  e  $\rho_{\downarrow}(0)$  para as duas direções de spin. Como as duas correntes se adicionam para dar a corrente total, a resistividade residual total será dada por:

$$\frac{1}{\rho(0)} = \frac{1}{\rho_{\uparrow}(0)} + \frac{1}{\rho_{\downarrow}(0)} \quad \text{ou} \quad \rho(0) = \frac{\rho_{\uparrow}(0) \rho_{\downarrow}(0)}{\rho_{\uparrow}(0) + \rho_{\downarrow}(0)} \quad (1)$$

Conforme a temperatura vai aumentando dois efeitos devem ser considerados. Em primeiro lugar, uma resistividade térmica  $\rho'_{f}(T)$  correspondendo a espalhamentos por fonons, deve ser adicionada para cada direção de spin e em geral  $\rho'_{f\uparrow}(T) \neq \rho'_{f\downarrow}(T)$ . (As linhas designam o fato de que as resistividades produzidas por fonons na liga podem ser bastante diferentes que as produzidas no metal puro).

Em segundo lugar, os elétrons podem ser flipados por ondas de spin e pode ocorrer espalhamento entre elétrons de spins opostos com transferência de momentum de uma direção de spin a outra. Depois de uma colisão em que o momentum total se conservou, cada elétron terá em média, a metade dos dois momenta iniciais. Esses são os processos que posteriormente tornaram o modelo conhecido pelo nome de "spin-mixing model".

É importante diferenciar entre esses processos e aqueles que também envolvem spin-flip, mas não conservam o momentum total. Estes últimos podem ser incluídos nas resistividades térmicas.

Os autores escreveram as equações de conservação do momentum para cada direção de spin, levando em conta que a taxa de acréscimo do momentum devido à aceleração dos elétrons de carga  $e$ , e massa  $m$  pelo campo elétrico  $\vec{E}$  é equilibrada pela taxa de decréscimo do momentum devido ao espalhamento com troca de momentum entre as duas direções de spin. Isto é:

$$\begin{aligned}
 -e\bar{E} &= m \frac{\bar{v}_\uparrow}{\tau_\uparrow} + \frac{1}{2} \frac{m}{\tau_{\uparrow\downarrow}} (\bar{v}_\uparrow - \bar{v}_\downarrow) \\
 -e\bar{E} &= m \frac{\bar{v}_\downarrow}{\tau_\downarrow} + \frac{1}{2} \frac{m}{\tau_{\uparrow\downarrow}} (\bar{v}_\downarrow - \bar{v}_\uparrow)
 \end{aligned} \quad (2)$$

Então, se  $n$  é a densidade de elétrons de condução para cada direção de spin, pode-se escrever para a densidade de corrente  $j$  e resistividade  $\rho$ :

$$j = ne\bar{v} \quad \text{e} \quad \rho = \frac{m}{me^2} \frac{1}{\tau} \quad (3)$$

E ainda:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\tau_\uparrow} &= \frac{me^2}{m} \left[ \rho_\uparrow(0) + \rho'_{f\uparrow}(T) \right] \\
 \frac{1}{\tau_\downarrow} &= \frac{me^2}{m} \left[ \rho_\downarrow(0) + \rho'_{f\downarrow}(T) \right]
 \end{aligned} \quad \text{e} \quad \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}} = \frac{me^2}{m} \rho_{f\uparrow\downarrow}(T) \quad (4)$$

onde  $\rho_{f\uparrow\downarrow}(T)$  é a resistividade envolvendo spin-flip.

Finalmente, a resistividade total à temperatura  $T$  é:

$$\rho(T) = \frac{\bar{E}}{j_\uparrow + j_\downarrow} \quad (5)$$

Com base nas equações (2), (3), (4) e (5) chega-se à seguinte fórmula:

$$\rho(T) = \frac{[\rho_\uparrow(0) + \rho'_{f\uparrow}(T)][\rho_\downarrow(0) + \rho'_{f\downarrow}(T)] + 1/2 \rho_{f\uparrow\downarrow}(T)[\rho_\uparrow(0) + \rho_\downarrow(0) + \rho'_{f\uparrow}(T) + \rho'_{f\downarrow}(T)]}{\rho_\uparrow(0) + \rho_\downarrow(0) + \rho'_{f\uparrow}(T) + \rho'_{f\downarrow}(T)} \quad (6)$$

A baixas temperaturas, a relação acima adquire uma forma mais simples. Assume-se  $\rho'_{f\uparrow\downarrow}(T)$  pequeno e ainda:

$$\rho'_{f\uparrow}(T) = \rho'_{f\downarrow}(T) = \rho'_{f\uparrow\downarrow}(T) = \rho'_{f\downarrow}(T)$$

Com isso, a baixas temperaturas:

$$\rho(T) = \rho(0) + \frac{1}{2} \rho_f(T) + \frac{1}{2} \left[ \frac{\rho_{\uparrow}(0) - \rho_{\downarrow}(0)}{\rho_{\uparrow}(0) + \rho_{\downarrow}(0)} \right] [\rho_f(T) + \rho_{\uparrow\downarrow}(T)] \quad (7)$$

O terceiro termo desta fórmula fornece o desvio da regra de Mathiessen. Pode-se observar que  $\Delta\rho(T)$  será sempre positivo e será zero somente quando  $\rho_{\uparrow}(0) = \rho_{\downarrow}(0)$ . Campbell et al., afirmaram que desde que as impurezas dos metais de transição são blindadas predominantemente pelos elétrons 3d, o efeito de blindagem será bastante diferente para as duas direções de spin, e  $\rho_{\uparrow}(0)$  e  $\rho_{\downarrow}(0)$  são provavelmente bastante diferentes. Cálculos realizados por Gomes<sup>(14)</sup> deram para as razões  $\rho_{\uparrow}(0) / \rho_{\downarrow}(0)$  valores que variam entre 5 e 10. Por outro lado, para as ligas de Fe contendo impurezas como Si e Al, a blindagem é na maior parte devido aos elétrons s e é de se esperar  $\rho_{\uparrow}(0) \simeq \rho_{\downarrow}(0)$ . Sugeriram, então os autores que as amostras contendo impurezas de transição devem apresentar grandes desvios da regra de Mathiessen, o mesmo não acontecendo para aquelas que contenham impurezas não pertencentes ao grupo de transição.

Observaram, finalmente, que o comportamento  $\Delta\rho \propto T^2$  a baixas temperaturas, sugere a presença de espalhamento elétron-elétron e elétron-magnon na resistividade  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$ .

## § 2. Formalismo para o "spin-mixing model"

No trabalho seguinte a este, Bouquard et al.<sup>(15)</sup>, calcularam para uma liga magnética o efeito na resistividade, da interação entre elétrons de spins opostos por intermédio de um potencial Coulombiano blindado do tipo:  $\frac{e^2}{r} \exp(-qr)$ . Isto é, verificaram o comportamento de  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$  devido a espalhamento entre elétrons, numa tentativa de justificar o desvio da regra de Mathiessen. Neste estudo, os autores usaram a mesma hipótese anteriormente proposta por Campbell, apenas com uma base formal mais rigorosa. Descreveram os

elétrons de condução com spins opostos se comportando diferentemente em presença de um campo elétrico, de tal modo que possuem funções distribuição de Fermi  $f_{\uparrow}$  e  $f_{\downarrow}$  diferentes para cada direção de spin, mesmo se estas distribuições possuem o mesmo valor de equilíbrio  $f^0$  sem campo elétrico.

As duas equações de Boltzmann linearizadas foram estabelecidas para cada direção de spin e usando teoria de transporte, obtiveram uma expressão para  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$  proporcional a  $T^2$ . Contudo, os cálculos da ordem de grandeza de  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$  a  $T = 100^{\circ}\text{K}$  apresentavam várias ordens de grandeza menores do que os resultados experimentais. Concluíram, os autores que o mecanismo de espalhamento elétron-elétron não poderia ser responsável pelos desvios da regra de Mathiessen em ligas ferromagnéticas diluídas.

Em 1969, Fert<sup>(16)</sup> forneceu mais um suporte teórico para o modelo original de Campbell, quando então, calculou a contribuição para  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$  devido a espalhamento elétron-magnons no Fe. Obteve resultados que estavam de acordo com os dados experimentais na forma geral e dentro de um fator dois em magnitude. Significa, portanto, que a contribuição dos magnons parece ser dominante em  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$  a baixas temperaturas.

### § 3. Comprovação experimental

Após o artigo de Campbell<sup>(13)</sup>, surgiram vários outros que apresentaram evidências experimentais de que em geral, o modelo das duas correntes é válido.

O primeiro deles, foi o de Farrell e Greig<sup>(17)</sup> em 1968. Este trabalho apresenta uma série de medidas da resistividade de ligas diluídas de Ni com Pd, Cu, Co, Fe, Mn, Cr, V e Ti no intervalo de  $1^{\circ}\text{K}$  a  $120^{\circ}\text{K}$ , nas quais foi possível observar que os desvios da regra de Mathiessen variam com  $T^2$ . Farrell e Greig interpretaram esses dados em termos de spin-mixing, usando o formalismo de-

envolvido por Bouquard<sup>(15)</sup> e concluíram que o modelo era capaz de descrever satisfatoriamente seus resultados experimentais.

No mesmo ano, Fert e Campbell<sup>(18)</sup> medindo as resistividades de ligas diluídas de Ni com Co, Mn, Cr e Ti entre 4 e 50°K, chegaram às mesmas conclusões que o artigo anterior com respeito à concordância do modelo.

A seguir Araj's et al<sup>(19)</sup> mediram a resistividade de ligas de Fe entre 4.2 e 300°K. Compararam seus resultados com o modelo de Campbell<sup>(13)</sup> e concluíram que o modelo poderia explicar a maior parte de seus dados. Contudo, observaram que os desvios da regra de Mathiessen para os metais de transição solutos Co e Ni eram pouco menores, e que os desvios para os metais solutos não pertencentes ao grupo de transição C, N e Sn eram pouco maiores do que o esperado com base na dicotomia metal de transição versus não transição estabelecida por aquele modelo. Salientaram que os dados poderiam ser igualmente categorizados em termos de posição na tabela periódica, uma vez que solutos à direita de Fe tendem a manifestar pequenos valores para  $\Delta\rho(T)$  enquanto solutos à esquerda manifestam grandes valores.

Em 1970, Durand e Gautier<sup>(20)</sup> mediram as resistividades de ligas diluídas de Ni e Co contendo impurezas da maior parte dos metais de transição. Analisaram seus resultados em termos de três contribuições: 1) devido ao modelo das duas correntes, 2) devido a existência de estados virtuais e 3) devido a um efeito periódico o qual foi atribuído à diferença nos potenciais efetivos dos íons dos metais de transição. Os resultados experimentais e a interpretação foram bastante similares tanto para as ligas de Ni como para as de Co.

Mais recentemente, novos suportes experimentais foram dados ao modelo de "duas correntes" nas referências<sup>(21), (22)</sup>. Na primeira delas, os autores sugerem inclusive, a necessidade de trabalhos teóricos que incluam considerações de processos alternativos

de espalhamento envolvendo spin-mixing.

Concluimos que os desvios da regra de Mathiessen observados em ligas magnéticas podem ser muito grande, particularmente para impurezas de metais de transição, e podem ser originados por uma variedade de fontes, incluindo: diferenças em anisotropia entre espalhamentos de elétrons s e d por impurezas; a existência das bandas s e d e sua interação; a existência de estados ligados virtuais; variações nas propriedades magnéticas frente o acréscimo de impurezas; e a condução associada com bandas de diferentes spins.

Esta última fonte, na forma do modelo spin-mixing, tornou-se atualmente o meio principal usado pelos experimentais para analisar seus resultados. Este modelo ocupa historicamente a mesma posição que o modelo de duas bandas ocupava em ligas não magnéticas. Se o modelo for correto, então, os cálculos de Bouquard et al (15) e Fert (16) sugerem firmemente que a origem do spin-mixing é o espalhamento elétron-magnon e que este é predominante na resistividade ideal mesmo para os metais e ligas magnéticas cujos desvios da regra de Mathiessen não são consideráveis.

## IV - RESISTIVIDADE ELÉTRICA DE METAIS MAGNÉTICOS A BAIXAS TEMPERATURAS

## § 1. Introdução

Neste capítulo, desenvolveremos o cálculo teórico da dependência da resistividade elétrica com a temperatura para metais magnéticos do grupo 3d e 4f e suas ligas diluídas com impurezas não magnéticas.

Usaremos o "modelo de duas correntes" descrito anteriormente, assumindo que a corrente é transportada por elétrons  $s$  e que o número  $n$  de elétrons de condução de spin  $\uparrow$  e spin  $\downarrow$  é o mesmo.

No capítulo I, vimos que na aproximação do tempo de relaxação, a equação de Boltzmann linearizada é dada pela relação (I-25). Tratando essa equação para elétrons de spin positivo e negativo, chegamos ao seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} e\hbar\vec{k}\cdot\vec{E}\frac{\partial f^{\circ}(E_{\uparrow})}{\partial E} &= -\frac{f_{\uparrow}(\vec{k})-f^{\circ}(E_{\uparrow})}{\tau_{\uparrow}} - \frac{f_{\uparrow}(\vec{k})-f_{\downarrow}(\vec{k})}{\tau_{\uparrow\downarrow}} \\ e\hbar\vec{k}\cdot\vec{E}\frac{\partial f^{\circ}(E_{\downarrow})}{\partial E} &= -\frac{f_{\downarrow}(\vec{k})-f^{\circ}(E_{\downarrow})}{\tau_{\downarrow}} - \frac{f_{\downarrow}(\vec{k})-f_{\uparrow}(\vec{k})}{\tau_{\downarrow\uparrow}} \end{aligned} \quad (1)$$

Os termos  $(f_{\uparrow} - f_{\downarrow})/\tau_{\uparrow\downarrow}$  representam a tendência para uma equalização das duas correntes por colisões com spin flip.  $\tau_{\uparrow\downarrow}$  é o tempo de relaxação característico para esse processo de equalização. Similaneamente,  $(f^{\circ} - f_{\uparrow})/\tau_{\uparrow}$  e  $(f^{\circ} - f_{\downarrow})/\tau_{\downarrow}$  são os termos de relaxação para cada uma das correntes de spin  $\uparrow$  e  $\downarrow$ .

Pelo mesmo procedimento desenvolvido no capítulo anterior, é possível a partir das relações (1), obter a expressão da resistividade total,  $\rho(T)$  (rel. III(6)). Mas, como vimos, a baixas temperaturas o termo dominante na resistividade ideal é  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$ . Vamos, portanto, a seguir nos deter no cálculo explícito de  $\rho_{\uparrow\downarrow} \propto 1/\tau_{\uparrow\downarrow}$

§ 2. Expressão para  $1/\tau_{AV}$ 

Para um elétron incidente com vetor de onda  $\vec{k}$  e spin  $\uparrow$ , a equação de Bloch (I-21) fica:

$$-e\hbar \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{m^*} \frac{\partial f^0(E_{\uparrow})}{\partial E} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \sum_i \int [\phi_{\uparrow}(\vec{k}) - \phi_i(\vec{k}')] P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'i\} d\vec{k}' \quad (2a)$$

onde se considerou  $\nabla T = 0$  e  $\vec{H} = 0$ . O índice  $i$  no somatório vale para colisões com elétrons  $s\uparrow$ ,  $s\downarrow$ ,  $d\uparrow$  e  $d\downarrow$ .

Analogamente, para elétrons incidentes com vetor de onda  $\vec{k}$  e spin  $\downarrow$  temos:

$$-e\hbar \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{m^*} \frac{\partial f^0(E_{\downarrow})}{\partial E} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \sum_i \int [\phi_{\downarrow}(\vec{k}) - \phi_i(\vec{k}')] P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'i\} d\vec{k}' \quad (2b)$$

Assumindo uma solução do tipo

$$\phi_i(\vec{k}) = \alpha_i \vec{k} \cdot \vec{E} \quad (3)$$

as equações de Bloch para as duas direções de spins ficam:

$$-e\hbar \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{m^*} \frac{\partial f^0(E_{\uparrow})}{\partial E} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \sum_i \int (\alpha_{\uparrow} \vec{k} \cdot \vec{E} - \alpha_i \vec{k}' \cdot \vec{E}) P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'i\} d\vec{k}' \quad (4a)$$

$$-e\hbar \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{m^*} \frac{\partial f^0(E_{\downarrow})}{\partial E} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \sum_i \int (\alpha_{\downarrow} \vec{k} \cdot \vec{E} - \alpha_i \vec{k}' \cdot \vec{E}) P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'i\} d\vec{k}' \quad (4b)$$

O próximo passo consiste em expressar  $\vec{k}' \cdot \vec{E}$  em termos de  $\vec{k} \cdot \vec{E}$ . Afim de que isso seja possível, vamos assumir que as bandas de energia são esféricas e que as probabilidades de transição  $P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'i\}$  dependem somente de  $\vec{k}' - \vec{k}$  e do ângulo  $\theta$  entre  $\vec{k}$  e  $\vec{k}'$ . Então a integração em  $\vec{k}'$  na (4) pode ser feita mantendo-se  $k'$ ,  $\vec{k}$ ,  $\theta$  e  $|\vec{k}' - \vec{k}|$  fixos.

Em coordenadas esféricas temos (fig.1)

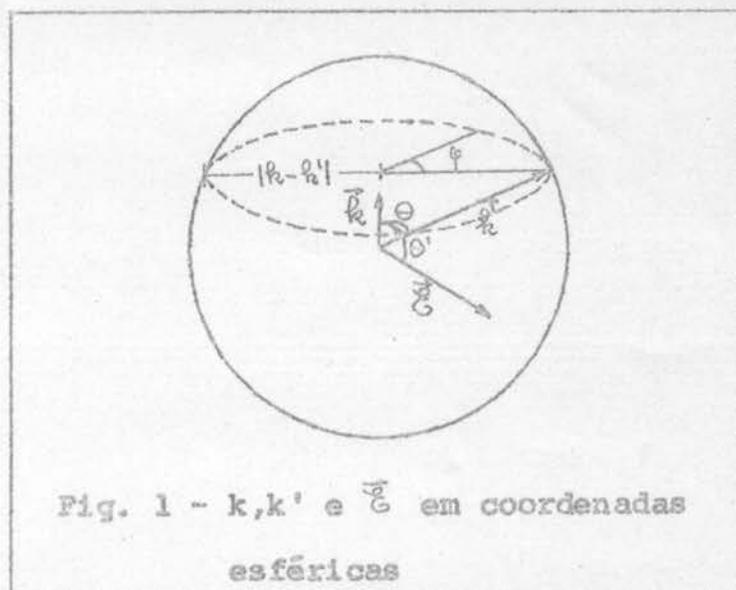


Fig. 1 -  $k, k'$  e  $\vec{E}$  em coordenadas esféricas

$$\vec{k}' = k' \begin{pmatrix} \text{sen}\theta \cos\varphi \\ \text{sen}\theta \text{sen}\varphi \\ \text{cos}\theta \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\vec{E} = |\vec{E}| \begin{pmatrix} \text{sen}\theta' \\ 0 \\ \text{cos}\theta' \end{pmatrix} \quad (6)$$

Então:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \vec{k}' \cdot \vec{E} = k' |\vec{E}| \text{cos}\theta \text{cos}\theta' = \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{k} k' \text{cos}\theta \quad (7)$$

Ou equivalentemente:

$$\vec{k}' \cdot \vec{E} \iff \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{k} k' \text{cos}\theta \quad (8)$$

Substitui-se este último resultado nas relações (4). Vamos desprezar no somatório destas, os coeficientes  $\alpha_{d\uparrow}$  e  $\alpha_{d\downarrow}$  para os elétrons  $d$ , cuja massa efetiva é muito maior que a dos elétrons  $s$ . Na relação (4a) vamos separar o lado direito em um termo em  $\alpha_{\uparrow}$  e outro em  $(\alpha_{\uparrow} - \alpha_{\downarrow})$  e analogamente para a (4b), obtendo assim:

$$\begin{aligned} -e\hbar \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{m^*} \frac{\partial f^0(E_{\uparrow})}{\partial E} &= \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{k_B T} \frac{V}{(2\pi)^3} \left\{ \alpha_{\uparrow} \left[ \int (1 - \frac{k'}{k} \text{cos}\theta) P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\uparrow\} d\vec{k}' + \right. \right. \\ &+ \int (1 - \frac{k'}{k} \text{cos}\theta) P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' + \int P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'d\uparrow\} d\vec{k}' + \\ &\left. \left. + \int P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'d\downarrow\} d\vec{k}' \right] + (\alpha_{\uparrow} - \alpha_{\downarrow}) \int \text{cos}\theta \frac{k'}{k} P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' \right\} \quad (9a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 -e \hbar \vec{k} \cdot \vec{E} \frac{\partial f^0(E_\downarrow)}{m^* \partial E} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\vec{k} \cdot \vec{E}}{k_B T} \left\{ \alpha_\downarrow \left[ \int (1 - \frac{k'}{k} \cos \theta) P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' + \right. \right. \\
 &+ \int (1 - \frac{k'}{k} \cos \theta) P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\uparrow\} d\vec{k}' + \int P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' + \\
 &\left. \left. + \int P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\uparrow\} d\vec{k}' \right] + (\alpha_\downarrow - \alpha_\uparrow) \int \cos \theta \frac{k'}{k} P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\uparrow\} d\vec{k}' \right\} \quad (9b)
 \end{aligned}$$

A fim de calcular  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}$  precisamos ainda das equações de Boltzmann acopladas (rel. (1)), nas quais se substitui a relação (3), obtendo o seguinte sistema:

$$e \hbar \vec{k} \cdot \vec{E} \frac{\partial f^0(E_\uparrow)}{m^* \partial E} = \vec{k} \cdot \vec{E} \left\{ \alpha_\uparrow \frac{\partial f^0(E_\uparrow)}{\partial E} \frac{1}{\tau_\uparrow} + (\alpha_\uparrow - \alpha_\downarrow) \frac{\partial f^0(E_\downarrow)}{\partial E} \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}} \right\} \quad (10a)$$

$$e \hbar \vec{k} \cdot \vec{E} \frac{\partial f^0(E_\downarrow)}{m^* \partial E} = \vec{k} \cdot \vec{E} \left\{ \alpha_\downarrow \frac{\partial f^0(E_\downarrow)}{\partial E} \frac{1}{\tau_\downarrow} + (\alpha_\downarrow - \alpha_\uparrow) \frac{\partial f^0(E_\uparrow)}{\partial E} \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}} \right\} \quad (10b)$$

Finalmente, comparando nas relações (9) e (10) os termos de mesmo coeficiente  $\alpha_i$ , obtemos quatro equações das quais os tempos de relaxação podem ser obtidos:

$$\begin{aligned}
 -\frac{\partial f^0(E_\uparrow)}{\partial E} \frac{1}{\tau_\uparrow} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \left\{ \int (1 - \frac{k'}{k} \cos \theta) P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' + \right. \\
 &+ \int (1 - \cos \theta \frac{k'}{k}) P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' + \int P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\uparrow\} d\vec{k}' + \left. \int P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' \right\} \quad (11a)
 \end{aligned}$$

$$-\frac{\partial f^0(E_\uparrow)}{\partial E} \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \left\{ \int \cos \theta \frac{k'}{k} P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' \right\} \quad (11b)$$

$$-\frac{\partial f^0(E_\downarrow)}{\partial E} \frac{1}{\tau_\downarrow} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \left\{ \int (1 - \frac{k'}{k} \cos \theta) P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' + \right.$$

$$+ \left. \int (1 - \cos \theta \frac{k'}{k}) P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\uparrow\} d\vec{k}' + \int P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\downarrow\} d\vec{k}' + \int P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\uparrow\} d\vec{k}' \right\} \quad (11c)$$

$$-\frac{\partial f^0(E_{\downarrow})}{\partial E} \frac{1}{\tau_{\downarrow\uparrow}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int \cos\theta \frac{k'}{k} P\{\vec{k}\downarrow, \vec{k}'\uparrow\} d\vec{k}' \quad (11d)$$

Nas relações (11a) e (11c), o primeiro e o terceiro termos levam em conta transições sem spin-flip; destas o termo s-d é o mais importante. O segundo e o quarto termos representam transições com spin-flip. Suas contribuições para o tempo de relaxação foram calculadas nas referências (8), (23), (24) e (25) para interações com ondas de spin. Deve-se notar ainda que o processo  $s\uparrow \rightarrow s\downarrow$  contribui simultaneamente para  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}$  e  $1/\tau_{\downarrow\uparrow}$ , mas a existência do coeficiente  $(1 - \cos\theta k'/k)$  significa que a sua contribuição é menor em  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}$  do que em  $1/\tau_{\downarrow\uparrow}$ .

É possível demonstrar que as relações (11b) e (11d) são idênticas, isto é  $\tau_{\uparrow\downarrow}$  é igual a  $\tau_{\downarrow\uparrow}$ , uma consequência decorrente da simetria das probabilidades de transição para os processos  $\vec{k}\uparrow \rightarrow \vec{k}'\downarrow$  e  $\vec{k}\downarrow \rightarrow \vec{k}'\uparrow$ , para uma interação de troca s-d.

O passo seguinte no cálculo do tempo de relaxação envolvendo spin-flip, consiste em calcular as probabilidades de transição.

Até aqui, não se fez nenhuma suposição especial a cerca do processo de espalhamento, exceto de que somente dois elétrons participam da colisão. Já havíamos, no entanto, mencionado que no modelo de duas correntes para a condução, a contribuição mais importante ao tempo de relaxação  $\tau_{\uparrow\downarrow}$ , a baixas temperaturas é devido às ondas de spin. Nos parágrafos seguintes, vamos analisar mais detalhadamente este processo, calculando as probabilidades de transição. Esse cálculo será feito, primeiramente para uma interação de troca s-d e após introduziremos uma perturbação (§ 7).

### § 3. Probabilidades de emissão e absorção de magnons.

Para um espalhamento elétron-elétron com absorção ou emissão de magnons via interação de troca s-d, Keffer<sup>(26)</sup> mostrou

que apenas dois processos envolvendo spin-flip são possíveis, quais sejam:



O primeiro processo corresponde a uma absorção de magnon e o segundo a uma emissão.

As probabilidades de transição para esses dois processos serão representadas respectivamente por  $P^0\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k}+\vec{q})\downarrow\}$  e  $P^0\{\vec{k}\downarrow, (\vec{k}-\vec{q})\uparrow\}$  e dadas pela regra de ouro<sup>(27)</sup>:

$$P^0\{\vec{k}i, \vec{k}'i'\} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}'i' | \mathcal{H}_{s.d} | \vec{k}i \rangle|^2 \delta(E_{i'} - E_i) \quad (12)$$

onde  $\mathcal{H}_{s.d}$  é o hamiltoniano de Kasuya (relação II-8).

#### § 4. Aproximação de Holstein-Primakoff

Para que possamos desenvolver o cálculo do elemento de matriz da relação (12), vamos escrever o hamiltoniano de Kasuya utilizando a aproximação de Holstein-Primakoff<sup>(28)</sup>.

Como sabemos, a baixas temperaturas a relação de dispersão para magnons se comporta de maneira análoga a um sistema de osciladores harmônicos independentes. Em 1940, Holstein e Primakoff introduziram uma técnica bastante útil a qual explora essa analogia com o oscilador harmônico. Essa aproximação está baseada na expressão dos operadores de spin em termos dos operadores criação e destruição de oscilador harmônico. Por exemplo, considere-se o efeito de  $S_i^-$  agindo em  $|M_s\rangle$ :

$$S_i^- |M_s\rangle = \sqrt{(S+M_s)(S-M_s+1)} |M_{s-1}\rangle \quad (13)$$

Introduzindo-se o operador "desvio de spin":  $\hat{n}_1 = S - S_1^z$  com números quânticos  $n_1 = S - M_z$ , esta relação fica:

$$S_1^- |m_i\rangle = \sqrt{2S} \sqrt{m_i+1} \sqrt{1-m_i/2S} |m_i+1\rangle \quad (14)$$

O operador  $b^+$ , do oscilador harmônico possui a propriedade de (como consequências de suas relações de comutação) de:

$$b^+ |m\rangle = \sqrt{m+1} |m+1\rangle \quad (15)$$

Além disso, faz-se as associações:

$$\begin{aligned} S_i^- &= \sqrt{2S} b_i^+ f_i(S) \\ S_i^+ &= \sqrt{2S} f_i(S) b_i \\ S_i^z &= S - b_i^+ b_i \end{aligned} \quad (16)$$

onde  $f_i(S) = \sqrt{1 - \frac{b_i^+ b_i}{2S}}$ . Este fator torna a transformação não linear. É fácil verificar que estas combinações satisfazem as relações de comutação. Tratando com sistemas acoplados é conveniente introduzir as componentes de Fourier. Isto sugere uma expansão dos operadores de acordo:

$$\begin{aligned} b_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} b_{\mathbf{k}} \\ b_i^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} b_{\mathbf{k}}^+ \end{aligned} \quad (17)$$

Nos referiremos aos operadores  $b_{\mathbf{k}}$  e  $b_{\mathbf{k}}^+$  como os operadores aniquilação e criação de magnons, respectivamente. Os operadores de spin, podem ser escritos em termos destes operadores como:

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \sqrt{\frac{2S}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} b_{\mathbf{k}} - \frac{1}{N\sqrt{8NS}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}'')\cdot\vec{R}_i} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}''} + \dots \\ S_i^- &= \sqrt{\frac{2S}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} b_{\mathbf{k}}^+ - \frac{1}{N\sqrt{8NS}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''} e^{-i(\vec{k}+\vec{k}'-\vec{k}'')\cdot\vec{R}_i} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}'}^+ b_{\mathbf{k}''} + \dots \\ S_i^z &= S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}_i} b_{\mathbf{k}'}^+ b_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (18)$$

Tomando somente o primeiro termo das expansões para  $S_i^-$  e  $S_i^+$  na rel. (18) e substituindo no hamiltoniano de Kasuya obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{s,d} = & \sum_{k,k'} \sum_m J(\vec{k}' - \vec{k}) e^{i(\vec{R} - \vec{R}'). \vec{R}_m} \left\{ (a_{k'\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{k'\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}) \times \right. \\ & \times \left( s - \frac{1}{N} \sum_{q,q'} e^{i(\vec{Q} - \vec{Q}') \cdot \vec{R}_m} b_q^\dagger b_{q'} \right) + \sqrt{\frac{2s}{N}} \left( a_{k'\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} \sum_q e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_m} b_q^\dagger + \right. \\ & \left. \left. + a_{k'\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} \sum_q e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_m} b_q \right) \right\} \quad (19) \end{aligned}$$

Não levando em conta processos umklapp, podemos simplificar a expressão acima, considerando que:

$$\frac{1}{N} \sum_m e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_m} = \delta_{\vec{Q},0} \quad (20)$$

E a (19) fica, finalmente:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{s,d} = & J(0) \sum_k (a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}) \left( s - \sum_q b_q^\dagger b_q \right) + \\ & + \sqrt{2sN} \sum_{k,q} J(\vec{q}) \left\{ a_{(k-q)\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} b_q^\dagger + a_{(k+q)\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} b_q \right\} \quad (21) \end{aligned}$$

### § 5. Cálculo das probabilidades de transição

Para uma transição  $\vec{k}\uparrow \rightarrow (\vec{k}+\vec{q})\downarrow$  com aniquilação de uma onda de spin  $\vec{q}$ , o primeiro termo da (21) não contribui e a probabilidade de transição dada pela (12) fica:

$$\begin{aligned} P^0\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k}+\vec{q})\downarrow\} = & \frac{4\pi}{\hbar} Ns \left| \langle (\vec{k}+\vec{q})\downarrow \left| \sum_{k,q} J(q) b_q^\dagger a_{(k-q)\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} + \right. \right. \\ & \left. \left. + b_q a_{(k+q)\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} \right| \vec{k}\uparrow \rangle \right|^2 \delta(E_{\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}) - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_q) \quad (22) \end{aligned}$$

onde  $\epsilon_q$  é a energia da onda de spin  $\vec{q}$ .

Vamos calcular agora o elemento de matriz

$$A_0 = 2NS \langle (\vec{k} + \vec{q}) \downarrow | \sum_{k,q} J(\vec{q}) (b_q^\dagger a_{(k-q)\downarrow}^\dagger + b_q a_{(k+q)\downarrow}^\dagger) | \vec{k} \uparrow \rangle |^2 \quad (23)$$

Ou:

$$A_0 = 2NS \langle \vec{k} \uparrow | \sum_{k,q} J(\vec{q}) (b_q a_{(k-q)\uparrow}^\dagger + b_q^\dagger a_{(k+q)\downarrow}^\dagger) | (\vec{k} + \vec{q}) \downarrow \rangle \times \\ \times \langle (\vec{k} + \vec{q}) \uparrow | \sum_{k',q'} J(\vec{q}') (b_{q'}^\dagger a_{(k'-q')\uparrow}^\dagger + b_{q'} a_{(k'+q')\downarrow}^\dagger) | \vec{k} \uparrow \rangle \quad (24)$$

Usando as propriedades dos operadores criação e destruição, obtemos:

$$A_0 = 2NS J(\vec{q})^2 \langle b_q^\dagger b_q a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} a_{(k+q)\downarrow} a_{(k+q)\downarrow}^\dagger \rangle \quad (25)$$

Assumindo que as componentes de Fourier  $b_q^\dagger b_q$ ,  $a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow}$  e  $a_{k+q\downarrow}^\dagger a_{k+q\downarrow}$  são independentes entre si, podemos escrever:

$$A_0 = 2NS J(\vec{q})^2 \langle b_q^\dagger b_q \rangle \langle a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} \rangle \langle a_{(k+q)\downarrow} a_{(k+q)\downarrow}^\dagger \rangle \quad (26)$$

onde

$$\langle a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} \rangle = n_{k\uparrow} = f^0(E_\uparrow(\vec{k}))$$

$$\langle a_{(k+q)\downarrow} a_{(k+q)\downarrow}^\dagger \rangle = 1 - n_{(k+q)\downarrow} = 1 - f^0(E_\downarrow(\vec{k} + \vec{q}))$$

e

$$\langle b_q^\dagger b_q \rangle = n_q = 1 / (e^{\epsilon_q \beta} - 1)$$

A relação (22) fica finalmente:

$$P^0 \{ \vec{k} \uparrow (\vec{k} + \vec{q}) \downarrow \} = \frac{4\pi}{h} NS J(\vec{q})^2 f^0(E_\uparrow(\vec{k})) [1 - f^0(E_\downarrow(\vec{k} + \vec{q}))] \times \\ \times \frac{1}{e^{\epsilon_q \beta} - 1} \delta(E_\downarrow(\vec{k} + \vec{q}) - E_\uparrow(\vec{k}) - \epsilon_q) \quad (27)$$

De maneira análoga, a probabilidade de transição  $\vec{k} \downarrow \rightarrow (\vec{k} - \vec{q}) \uparrow$ , correspondendo a uma emissão de um magnon é dada por:

$$P^0\{\vec{k}\downarrow, (\vec{k}-\vec{q})\uparrow\} = \frac{4\pi SN}{\hbar} \langle \vec{k}\downarrow | \sum_{k,Q} b_Q a_{k\downarrow}^+ a_{(k-Q)\uparrow} | (\vec{k}-\vec{q})\uparrow \rangle \times$$

$$\times \langle (\vec{k}-\vec{q})\uparrow | \sum_{k',Q'} b_{Q'}^+ a_{(k'-Q')\uparrow} a_{k'\downarrow} | \vec{k}\downarrow \rangle \delta(E_{\uparrow}(\vec{k}-\vec{q}) - E_{\downarrow}(k) + \epsilon_q) \quad (28)$$

E, finalmente:

$$P^0\{\vec{k}\downarrow, (\vec{k}-\vec{q})\uparrow\} = \frac{4\pi SN J(\vec{q})^2}{\hbar} \frac{f^0(E_{\downarrow}(k)) [1 - f^0(E_{\uparrow}(\vec{k}-\vec{q}))]}{1 - e^{-\epsilon_q/\beta}} \delta(E_{\uparrow}(\vec{k}-\vec{q}) - E_{\downarrow}(k) + \epsilon_q) \quad (29)$$

As relações (27) e (29) quando substituídas em (11b) e (11d) respectivamente nos dão os valores de  $1/\tilde{\gamma}_{\downarrow\downarrow}^0$  e  $1/\tilde{\gamma}_{\downarrow\uparrow}^0$ , cuja igualdade é demonstrável.

Vamos, a seguir calcular explicitamente  $1/\tilde{\gamma}_{\downarrow\downarrow}^0$  para o hamiltoniano de Kasuya não perturbado.

### § 6. Cálculo de $1/\tilde{\gamma}_{\downarrow\downarrow}^0$ não perturbado

Para calcular  $1/\tilde{\gamma}_{\downarrow\downarrow}^0$  usamos a relação (11b):

$$-\frac{\partial f^0(E_{\uparrow})}{\partial E} \frac{1}{\tilde{\gamma}_{\downarrow\downarrow}^0} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int \cos\theta \frac{|\vec{k}+\vec{q}|}{k} P^0\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k}+\vec{q})\downarrow\} d\vec{q}$$

onde se substitui  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ .

Pela construção da fig. 2 podemos escrever:

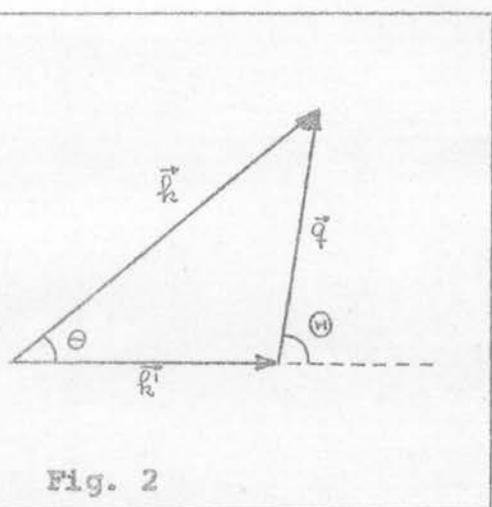


Fig. 2

$$|\vec{k}+\vec{q}| \cos\theta = k + q \cos\theta \quad (30)$$

Substituindo as relações (28) e (30) na (11b) temos:

$$\frac{\partial f^0(E_{\uparrow})}{\partial E} \frac{1}{\tilde{\gamma}_{\downarrow\downarrow}^0} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi SN J(\vec{q})^2}{k_B T \hbar} \times$$

$$\times \int q^2 dq d\varphi dx \left(1 + \frac{q}{k} x\right) f^0(E_{\uparrow}) (1 - f^0(E_{\uparrow} + \epsilon_q)) \delta(E_{\downarrow} - E_{\uparrow} - \epsilon_q) \quad (31)$$

onde se usou  $\vec{d}\vec{q}$  em coordenadas esféricas e se fez  $x = \cos\Theta$ .

Para calcular as integrais acima, devemos analisar mais detidamente o processo de espalhamento elétron-elétron com absorção de magnon e a situação dos níveis de energia.

Em um modelo de duas bandas para os elétrons  $s$ , a situação é mostrada em escala ampliada na figura 3.

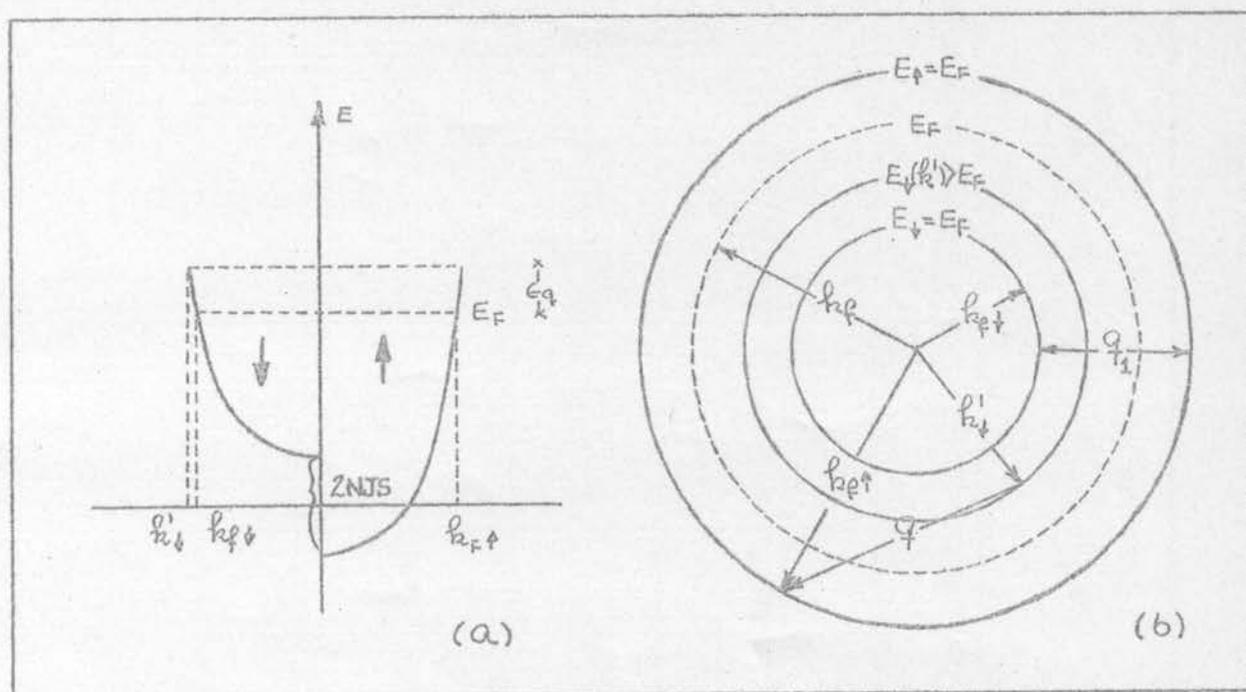


Fig. 3 - Esquema para os níveis de energia

Em (3a) representamos as relações de dispersão para os elétrons  $s$  nas duas direções de spin por:

$$E_{\uparrow}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - NJ(0)S$$

$$E_{\downarrow}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + NJ(0)S \quad (32)$$

Na figura (3b) estão representadas as duas superfícies de Fermi esféricas, com raios  $k_{F\uparrow}$  e  $k_{F\downarrow}$  diferentes por:

$$q_1 = \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{NJ(0)S}{k_F} \quad (33)$$

com  $q_1 \ll k_F$  e sendo  $k_F$  a média dos raios.

Vemos também que o valor máximo de  $q$  é  $2k_F$  e o seu valor mínimo é  $q_1$ . A integração em  $x$  na (31) é efetuada expressando a delta  $\delta(E_{\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}) - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_q)$  em termos das relações (32). Para a energia do magnon consideraremos dois casos.

a) Em primeiro lugar, para uma relação de dispersão quadrática  $\epsilon_q = \hbar^2 q^2 / 2\mu$ , teremos:

$$\delta(E_{\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}) - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_q) = \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \delta\left(x - \frac{q}{2k} \left(\frac{m^*}{\mu} - 1\right) + \frac{k_F}{k} \frac{q_1}{q}\right) \quad (34)$$

Sendo a massa efetiva do magnon  $\mu$ , dez vezes maior que a massa do elétron podemos desprezar a razão  $m^*/\mu$  na relação (34) e a integração em  $x$  da expressão (31) fica:

$$\int_{-1}^{+1} \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \left(1 + \frac{q}{k} x\right) \delta\left(x + \frac{q}{2k} + \frac{k_F}{k} \frac{q_1}{q}\right) dx \approx \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \left(1 - \frac{q^2}{2k^2} - \frac{k_F q_1}{k^2}\right) \quad (35)$$

Por outro lado, se considerarmos  $k$  próximo de  $k_F$ , as razões  $q/k_F$  e  $q_1/k_F$  são desprezíveis. Substituindo este último resultado na (31), realizando a integração em  $q$  e substituindo a variável  $q$  por  $\epsilon_q$  encontramos:

$$-\frac{\partial f^0(E_{\downarrow})}{\partial E} \frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}^0} = \frac{SNJ(0)^2}{\pi k_B T \hbar^5} \frac{m^* \mu}{k_F} \int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \frac{f^0(E_{\uparrow}(k)) [1 - f^0(E_{\uparrow}(k) + \epsilon_q)]}{e^{\epsilon_q \beta} - 1} d\epsilon_q \quad (36)$$

com  $\epsilon_1 = \hbar^2 q_1^2 / 2\mu$  e  $\epsilon_2 = \hbar^2 (2k_F)^2 / 2\mu$ .

Consideramos aqui  $J(q)$  como igual a  $J(0)$  para esses magnons.

A seguir, integramos ambos os lados da (36) com relação à variável  $E(k)$ . Considerando  $T_{\uparrow\downarrow}$  independente de  $E(k)$ , obtemos para o lado esquerdo

$$\frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}^0} \int \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) dE = \frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}^0} \quad (37)$$

onde se usou a relação (I-44). A integração pode ser estendida para limites infinitos porque as integrais são todas convergentes.

A integração em  $E(k)$  no lado direito da relação (36) é realizada, substituindo as funções distribuições de Fermi por seus valores e fazendo uma conveniente transformação de variáveis. O resultado a que se chega é o seguinte:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^0(E_{\uparrow}(k)) [1 - f^0(E_{\uparrow}(k) + \epsilon_q)] dE = \frac{\epsilon_q}{1 - e^{-\epsilon_q \beta}} \quad (38)$$

Reunindo os resultados (37) e (38), a expressão para o tempo de relaxação fica:

$$\frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^0} = \frac{SN I^2(0) m^* \mu}{\pi h^5 k_F} \frac{1}{k_B T} \int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \frac{\epsilon_q}{(1 - e^{-\epsilon_q \beta})(e^{\epsilon_q \beta} - 1)} d\epsilon_q \quad (39)$$

Para baixas temperaturas  $\epsilon_2 \gg k_B T$ , de tal forma que:

$$\frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^0} = \frac{SN I^2(0) m^* \mu}{\pi h^5 k_F} k_B T \int_{T_1/T}^{\infty} \frac{z}{(1 - e^{-z})(e^z - 1)} dz \quad (40)$$

com  $z = \epsilon_q \beta$  e  $T_1 = \frac{1}{2} \hbar^2 q_1^2 / k_B (2\mu)$

Após calcular a integral acima<sup>(29)</sup>, obtemos finalmente:

$$\frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^0} = \frac{SN I^2(0) m^* \mu k_B}{\pi h^5 k_F T_1} T^2 F(z_1), \quad F(z_1) = z_1 \left\{ \frac{z_1 e^{z_1}}{e^{z_1} - 1} - \ln(e^{z_1} - 1) \right\} \quad (41)$$

$z_1 = T_1/T$

a qual dá a dependência da resistividade  $\rho_{\uparrow\downarrow}$  com a temperatura no limite de baixas temperaturas, para uma relação de dispersão quadrática.

O resultado (41) coincide com o obtido por Fert<sup>(16)</sup>.

b) Em segundo lugar, vamos considerar uma relação de dispersão linear  $\epsilon_q = Aq$ .

Esta relação é mais adequada para o grupo de transição dos metais terras raras com ordenação magnética espiral<sup>(30), (31)</sup>.

Neste caso, a relação (34) fica:

$$\delta(E_{\downarrow}(\vec{k}+\vec{q}) - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_q) = \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \delta\left(\alpha + \frac{q}{2k_F} + \frac{k_F}{k} \frac{q_1}{q} - \frac{m^*}{k_F \hbar^2} A\right) \quad (34')$$

Assumindo  $k_F \gg q_1$  e  $\epsilon_{k_F} \ll E(k_F)$ , a integração em  $x$  na expressão (31) fica:

$$\int_{-1}^{+1} \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \left(1 + \frac{q}{k} \alpha\right) \delta\left(\alpha + \frac{q}{2k_F} + \frac{k_F}{k} \frac{q_1}{q} - \frac{m^*}{k_F \hbar^2} A\right) d\alpha \approx \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \quad (35')$$

E por um procedimento análogo ao desenvolvido através das relações (36)-(39), encontramos:

$$\frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}^0} = \frac{SNJ(0)^2 V m^*}{\pi \hbar^3 k_F A^2} \frac{1}{k_B T} \int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \frac{\epsilon_q^2}{(1 - e^{-\epsilon_q \beta})(e^{\epsilon_q \beta} - 1)} d\epsilon_q \quad (39')$$

onde  $\epsilon_{11} = Aq_1$  e  $\epsilon_2 = A(2k_F)$ , conforme fig. 3b).

No limite de baixas temperaturas  $\epsilon_2 \gg k_B T$ , e

$$\frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}^0} = \frac{SNJ(0)^2 V m^*}{\pi \hbar^3 k_F A^2} (k_B T)^2 \int_{z_1}^{\infty} \frac{z^2}{(1 - e^{-z})(e^z - 1)} dz \quad (40')$$

com  $z = \epsilon_q \beta$  e  $z_1 = Aq_1 / k_B T$ .

Após calcular a integral acima, obtemos a seguinte função não elementar:

$$\frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}^0} = \frac{SNJ(0)^2 V m^*}{\pi \hbar^3 k_F A^2} \frac{1}{k_B^2} T^2 G(z_1); \quad G(z_1) = \frac{z_1^2}{e^{z_1} - 1} + 2 \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{e^{-\lambda z_1}}{\lambda^2} (1 + \lambda z_1) \quad (41')$$

No limite para  $z_1 \rightarrow 0$ ,  $G(z_1)$  tende para o valor  $\pi^2/3$ , e  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}^0$  apresenta uma dependência com  $T^2$ . Esse comportamento com  $T^2$  para a resistividade ideal foi verificado experimentalmente para Tb e Dy num intervalo de temperatura de 20°K a 60°K (2), (3). No entanto, para o Gd, Colvin e Arajs (32) encontraram uma dependência aproximada com  $T^4$ . O mesmo comportamento foi observado em Ho, Er e Tm (2), (3). Assim, se em vez de  $\epsilon_q = Aq$ , assumirmos para a relação de dispersão das ondas de spins  $\epsilon_q = Aq^\nu$  com  $\nu$  arbitrário,  $1/2 \leq \nu \leq 1$ , teremos:

$$q dq \rightarrow \frac{1}{A^{(2-\nu)/\nu}} \frac{1}{\nu} \epsilon_q^{(2-\nu)/\nu} d\epsilon_q$$

e

$$\frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^\nu} \sim \frac{1}{A^2} (k_B T)^{2/\nu} \int_{z_1}^{\infty} \frac{z^{2/\nu}}{(1-e^{-z})(e^z-1)} dz$$

Para  $\nu = 1/2$ , por exemplo, a expressão acima fica

$$\frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^0} = \frac{1}{2\pi} \frac{q_1}{\hbar} \left(\frac{k_B}{A}\right)^4 \nu J(0) T^4 H(z_1) \quad \text{onde}$$

$$H(z_1) = \frac{z_1^4}{e^{z_1}-1} + 4! \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{e^{-\lambda z_1}}{\lambda^4} \left(1 + \lambda z_1 + \frac{(\lambda z_1)^2}{2!} + \frac{(\lambda z_1)^3}{3!}\right) \quad (42)$$

O que teoricamente explica a dependência com  $T^4$  dos metais terras raras pesados, Gd, Ho, Er e Tm.

### § 7. Cálculo do tempo de relaxação perturbado

Vamos estudar aqui, a variação do tempo de relaxação  $\hat{\tau}_{\uparrow\downarrow}$  com a temperatura e a conseqüente variação na resistividade elétrica  $\rho_{\uparrow\downarrow}$ , devido à introdução na matriz magnética anterior, de uma perturbação correspondente a uma impureza não magnética. Vamos assumir que a impureza introduzida esteja localizada no sítio 1, dada pelo vetor posição  $\vec{R}_1 = 0$  e que possua um potencial localizado

$U_{loc}$ . Neste caso, o hamiltoniano de interação do sistema é dado por:

$$H_0 = H_{s-d} - H_1 + U_{loc} \quad (43)$$

onde o termo  $(H_{s-d} - H_1)$  leva em conta a presença na matriz magnética de um sítio sem spin e  $U_{loc}$  é dado por:

$$U_{loc} = \frac{1}{N} \sum_{k, k', \sigma} v(\vec{k}, \vec{k}') e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_1} a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma}$$

Contudo, este termo não contribuirá para a probabilidade de transição  $P\{\vec{k}\uparrow, \vec{k}'\downarrow\}$  e por isso será desprezado.

Escrevemos explicitamente a relação (43) com base na (21), da qual omitimos o primeiro termo uma vez que não contribui para a probabilidade de transição:

$$H_0 = \sqrt{2S} \sum_{k, q} J(\vec{q}) \left\{ a_{(k-q)\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} \left( \sqrt{N} b_q^\dagger - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q'} b_{q'}^\dagger \right) + a_{(k+q)\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} \left( \sqrt{N} b_q - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q''} b_{q''} \right) \right\} \quad (44)$$

A diferença entre as relações (21) e (44) reside no fato de que nesta última estamos subtraindo do sistema de spins localizados representado pelos operadores  $b_q^\dagger$  e  $b_q$ , os termos  $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q'} b_{q'}^\dagger$  e  $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q''} b_{q''}$  como decorrência das relações (17) e da suposição de que  $\vec{R}_1 = 0$ .

A probabilidade de transição para um processo de espalhamento  $\vec{k}\uparrow \rightarrow (\vec{k} + \vec{q})\downarrow$  com absorção de um magnon  $\vec{q}$  é dada, como vimos, por:

$$P\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k} + \vec{q})\downarrow\} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle (\vec{k} + \vec{q})\downarrow | H_0 | \vec{k}\uparrow \rangle \right|^2 \delta(E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}) - E_{\uparrow}(\vec{k}) - \epsilon_q) \quad (45)$$

Definiremos  $\left| \langle (\vec{k} + \vec{q})\downarrow | H_0 | \vec{k}\uparrow \rangle \right|^2 = A_1$

Substituindo o hamiltoniano  $\mathcal{H}$  pela relação (44) e conservando somente os termos diferentes de zero, temos:

$$A_1 = 2S \langle \vec{k} \uparrow | \sum_{k, q} J(\vec{q}) a_{k \uparrow}^+ a_{(k+q) \downarrow} (\sqrt{N} b_q^+ - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q''} b_{q''}^+) | (\vec{k} + \vec{q}) \downarrow \rangle \times \\ \times \langle (\vec{k} + \vec{q}) \downarrow | \sum_{k', q'} J(\vec{q}') a_{(k'+q') \downarrow}^+ a_{k' \uparrow} (\sqrt{N} b_{q'} - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q''} b_{q''}) | \vec{k} \uparrow \rangle \quad (46)$$

Em analogia com a (25), usamos as propriedades dos operadores criação e destruição e assumimos que as componentes de Fourier são independentes entre si, podendo escrever, então:

$$A_1 = 2S J(q)^2 \langle a_{k \uparrow}^+ a_{k \uparrow} \rangle \langle a_{(k+q) \downarrow} a_{(k+q) \downarrow}^+ \rangle \times \\ \langle N b_q^+ b_q - \sum_{q'} b_{q'}^+ b_{q'} - b_q^+ \sum_{q''} b_{q''} + \frac{1}{N} \sum_{q', q''} b_{q'}^+ b_{q''} \rangle \quad (47)$$

Assumimos que:

$$\sum_{q'} \langle b_{q'}^+ b_q \rangle = n_q \delta_{q', q} \\ \sum_{q''} \langle b_q^+ b_{q''} \rangle = n_q \delta_{q'', q} \\ \sum_{q', q''} \langle b_{q'}^+ b_{q''} \rangle = \sum_{q'} n_{q'} \delta_{q', q''} \quad (48)$$

sendo  $n_q$  a função distribuição de bosons.

Substituímos a seguir na relação (47), o resultado (48) e as relações (26) para os demais operadores, obtendo:

$$A_1 = 2S J(q)^2 f^0(E_q(k)) [1 - f^0(E_q(\vec{k} + \vec{q}))] \left\{ \frac{N-2}{e^{\epsilon_q \beta} - 1} + \frac{1}{N} \sum_{q'} \frac{1}{e^{\epsilon_{q'} \beta} - 1} \right\} \quad (49)$$

Para o caso mais geral, em que  $N_0$  impurezas não magnéticas estão presentes, a relação anterior fica:

$$A_1 = 2ST(q)^2 f^0(E_{\uparrow}(k)) [1 - f^0(E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}))] \left\{ \frac{N - 2N_0}{e^{\epsilon_q \beta} - 1} + \frac{N_0}{N} \sum_{Q'} \frac{1}{e^{\epsilon_{Q'} \beta} - 1} \right\} \quad (50)$$

E a probabilidade de transição para este sistema será:

$$P\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k} + \vec{q})\downarrow\} = \frac{4\pi S N J(q)^2}{\hbar} f^0(E_{\uparrow}(k)) [1 - f^0(E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}))] \times \\ \frac{1 - 2c}{e^{\epsilon_q \beta} - 1} \delta(E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}) - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_q) + \frac{c}{N} \sum_{Q'} \frac{1}{e^{\epsilon_{Q'} \beta} - 1} \delta(E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}) - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_{Q'}) \quad (51)$$

com  $c = N_0/N$  representando a concentração de íons não magnéticos.

Analisando a expressão acima, verificamos a contribuição de dois termos distintos. O primeiro é um termo praticamente não perturbado pela presença de impurezas, exceto no número de íons magnéticos e para o qual o vetor de onda se conserva. O segundo termo reflete a quebra de simetria de translação devido à presença de impurezas e para o qual não se conserva o vetor de onda. Este último termo é uma consequência do fato de que se uma excitação de vetor de onda  $\vec{q}$  é forçada sob um sistema de momentos localizados, a perturbação sentida pelos elétrons de condução contém uma mistura de componentes de Fourier e não somente a componente  $\vec{q}$ . Assim, quando o elétron absorve ou emite uma onda de spin, o vetor de onda não precisa ser conservado.

Podemos, portanto, escrever a probabilidade de transição relação (51), como:

$$P\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k} + \vec{q})\downarrow\} = (1 - 2c) P^0\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k} + \vec{q})\downarrow\} + P^1\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k} + \vec{q})\downarrow\} \quad (52)$$

sendo  $P^0\{\vec{k}\uparrow, (\vec{k} + \vec{q})\downarrow\}$  dado pela relação (27) e

$$P' \{ \vec{k}, (\vec{k} + \vec{q}) \downarrow \} = \frac{4\pi S}{h} c J(q)^2 f^0(E_{\uparrow}(k)) [1 - f^0(E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}))] \times \\ \times \sum_{Q'} \frac{1}{e^{\epsilon_{Q'}\beta} - 1} \delta(E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}) - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_{Q'}) \quad (53)$$

Consequentemente, o inverso do tempo de relaxação com spin-flip para esse sistema fica:

$$\frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}} = \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^0} (1 - 2c) + \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^1} \quad (54)$$

Como  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}^0$  já foi calculado no § 6, desenvolveremos a seguir o cálculo de  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}^1$ , correspondendo ao termo perturbado pela impureza e calculado através da (11b):

$$-\frac{\partial f^0(E_{\uparrow})}{\partial E} \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^1} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int d\vec{k}' \frac{k'}{k} \cos\theta P' \{ \vec{k}' \uparrow, \vec{k}' \downarrow \}$$

Para tanto, vamos reescrever a expressão (53), levando em conta a substituição  $\sum_{Q'} \rightarrow V/(2\pi)^3 \int dQ'$

a) Consideraremos em primeiro lugar, uma relação de dispersão quadrática para os magnons. Neste caso, a substituição acima fica:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} (4\pi) \int \frac{Q'^2}{e^{\epsilon_{Q'}\beta} - 1} \delta(E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}) - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_{Q'}) dQ' = \\ = \frac{V}{(2\pi)^2} \left( \frac{2\mu}{h^2} \right)^{3/2} \frac{[E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}) - E_{\uparrow}(k)]^{1/2}}{\exp[E_{\downarrow}(\vec{k} + \vec{q}) - E_{\uparrow}(k)]\beta - 1} \quad (55)$$

Substituindo este resultado na (53) e esta na (11b), encontramos:

$$-\frac{\partial f^0(E_{\uparrow}(k))}{\partial E} \frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}^1} = \frac{V^2}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \frac{S(2\mu)^{3/2}}{\pi h^4 k_F} e f^0(E_{\uparrow}(k)) \times \\ \times \int d\vec{k}' \frac{k'}{k} \cos\theta J(\vec{k} - \vec{k}')^2 \frac{[1 - f^0(E_{\downarrow}(k'))]}{\exp[E_{\downarrow}(k') - E_{\uparrow}(k)]\beta - 1} [E_{\downarrow}(k') - E_{\uparrow}(k)]^{1/2} dE(k') \quad (56)$$

A seguir, integramos em relação a  $E(k)$  a expressão acima, como já o fizemos para obter  $1/\bar{N}$ ; usando o elemento  $dk'$  em coordenadas esféricas e transformando a variável de integração  $\vec{k}'$  para  $E(k')$  obtemos:

$$\frac{1}{\bar{N}} = \frac{V^2}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \frac{5}{h k_F} \left(\frac{2\mu}{h^2}\right)^{3/2} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^2 c \int_{-1}^{+1} dx \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dE(k) f^0(E_\downarrow(k)),$$

$$\times \int_{E_\uparrow(k)}^{\infty} E_\downarrow(k') J^2(\vec{k}' - \vec{k}) \frac{[1 - f^0(E_\downarrow(k'))][E_\downarrow(k') - E_\uparrow(k)]^{1/2}}{\exp[E_\downarrow(k') - E_\uparrow(k)]\beta - 1} dE(k') \quad (57)$$

Nessa última expressão, a integração em  $x$  dará zero, exceto se assumirmos uma das duas possibilidades:

$$1^\circ) J(\vec{k}' - \vec{k})^2 = J_0^2 + J_1^2 \cos\theta + J_2^2 \cos^2\theta + \dots \quad (33) \quad \text{ou}$$

2º)  $J(\vec{k}' - \vec{k})^2 = J_0^2 \Theta(q_c - q)$ , onde  $\Theta(q_c - q)$  é a função de Heaviside.

Esta última hipótese, supõe a existência para os magnons, de um vetor de onda de corte  $\vec{q}_c$ , de tal forma que o ângulo entre  $\vec{k}$  e  $\vec{k}'$  varia de zero a  $\theta_c$  (fig. 4).

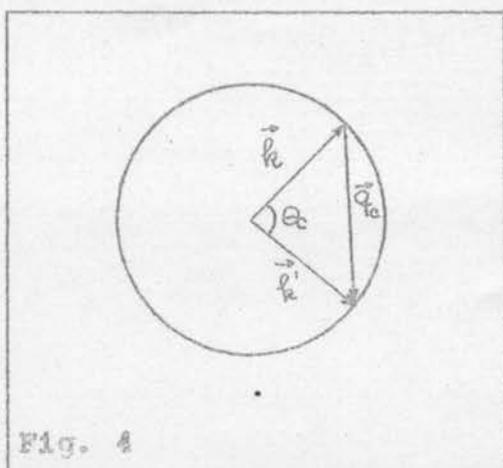


Fig. 4

1º caso)

Neste caso, a integração em  $x$  fica

$$\int_{-1}^{+1} (J_0^2 + J_1^2 x) x dx = \frac{2}{3} J_1^2 \quad (58)$$

A integração em  $E(k')$  é realizada aproximadamente, com a suposição de que a maior contribuição vem da superfície de Fermi e com as seguintes transformações de variáveis:

$$E(k) = \mathcal{E}(k) + E_F$$

$$E(k') = \mathcal{E}(k') + E_F$$

$$\mathcal{E}(k') - \mathcal{E}(k) = \mathcal{E} \quad (59)$$

Assim:

$$\frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}} \propto E_F \int_{-\infty}^{+\infty} f^0(\mathcal{E}(k) + E_F) [1 - f^0(\mathcal{E}(k) + E_F)] d\mathcal{E}(k) \int_0^{\infty} \frac{\mathcal{E}^{1/2} d\mathcal{E}}{e^{\mathcal{E}\beta} - 1} \quad (60)$$

A primeira integral dá simplesmente  $k_B T$  como consequência da relação (I-44) e a segunda integral (29):

$$\int_0^{\infty} \frac{\mathcal{E}^{1/2}}{e^{\mathcal{E}\beta} - 1} d\mathcal{E} = \beta^{-3/2} \Gamma(3/2) \zeta(3/2) \quad (61)$$

Assim, reunindo os resultados (61), (60) e (58), a expressão final para o inverso de  $T_{\uparrow\downarrow}$  é dada por:

$$\frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}} \approx \frac{V^2}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \frac{(2\mu)^{3/2}}{\hbar^6} 5 m^* J_1^2 k_F \Gamma(3/2) \zeta(3/2) k_B^{3/2} c T^{3/2} \quad (62)$$

2º caso)  $J(\vec{k}' - \vec{k})^2 = J_0^2 \Theta(x - x_c)$  com  $x = \cos \theta$ .

A integração em  $x$  da relação (57) fica:

$$J_0^2 \int_{\cos \theta_c}^1 x dx = \frac{J_0^2}{2} \text{sen}^2 \theta_c$$

Assim, basta substituir no 1º caso:

$$2/3 J_1^2 \rightarrow J_0^2/2 \text{sen}^2 \theta_c$$

E a expressão (62) fica:

$$\frac{1}{T_{\uparrow\downarrow}} \approx \frac{V^2}{(2\pi)^3} \frac{(2\mu)^{3/2}}{\hbar^6} 5 m^* J_0^2 k_F \Gamma(3/2) \zeta(3/2) \text{sen}^2 \theta_c k_B^{3/2} c T^{3/2} \quad (63)$$

As expressões (62) e (63) mostram um comportamento que varia linearmente com a concentração e com a lei  $T^{3/2}$  e cujas ordens de grandeza serão discutidas no parágrafo seguinte.

b) Considerando agora uma relação de dispersão linear para os magnons, a integração em  $\epsilon_{Q'}$  se modifica da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{V}{(2\pi)^3} (4\pi) \int \frac{Q'^2}{e^{\epsilon_{Q'}\beta} - 1} \delta(E_{\downarrow}(k') - E_{\uparrow}(k) - \epsilon_{Q'}) dQ' = \\ = \frac{V}{2\pi^2} \frac{1}{\Lambda^3} \frac{[E_{\downarrow}(k') - E_{\uparrow}(k)]^2}{\exp[E_{\downarrow}(k') - E_{\uparrow}(k)]\beta - 1} \end{aligned} \quad (55')$$

Desenvolvendo o cálculo de maneira análoga às relações (56) e (57), obtemos no 1º caso:

$$\frac{1}{\tilde{\gamma}_N^L} = \frac{V^2}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^2 \frac{S}{\hbar k_F A^3} E_F J_1^2 2 \zeta(3) k_B^3 c T^3 \quad (62')$$

E para o 2º caso:

$$\frac{1}{\tilde{\gamma}_N^1} = \frac{V^2}{(2\pi)^3} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^2 \frac{S}{\hbar k_F A^3} E_F J_0^2 \sin^2 \Theta_c 2 \zeta(3) k_B^3 c T^3 \quad (63')$$

Portanto, para uma relação de dispersão linear encontramos  $1/\tilde{\gamma}_{N\pm}^1$  proporcional à concentração e com uma dependência com a temperatura que varia com  $T^3$ .

## § 8. Discussão dos resultados e conclusões

O objetivo principal deste trabalho foi verificar a importância dos espalhamentos elétron-magnon na resistividade elétrica dos metais e ligas magnéticas, no limite de baixas temperaturas.

Dentro desse objetivo e, usando o formalismo do modelo de "duas correntes" desenvolvido por Bouquard<sup>(15)</sup> e Fert<sup>(16)</sup>, nossos cálculos podem ser divididos em duas partes distintas.

Na primeira parte, estudamos o comportamento dos metais magnéticos dos grupos 3d e 4f, através do cálculo de  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}^0$  (rels. (41), (41') e (42)). Consideramos aqui várias possibilidades para o espectro das ondas de spin, numa tentativa de obter a dependência com  $T^2$  e  $T^4$  observada na resistividade desses metais, a baixas temperaturas.

Na segunda parte, investigamos o comportamento da resistividade  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$  de ligas magnéticas contendo impurezas dilutas de elementos não magnéticos. Verificamos a necessidade de considerar uma forma mais realística para  $J(\vec{k}, \vec{k}')$ ; o que foi feito introduzindo-se efeitos de dependência angular entre  $\vec{k}$  e  $\vec{k}'$ . Os cálculos de  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}^1$  foram realizados para relações de dispersão quadrática (rels. (62) e (63)) e linear (rels. (62') e (63')).

Vamos a seguir comentar esses resultados e apresentar as estimativas das ordens de grandeza dos valores de  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}$  aqui obtidos, afim de que possamos compará-los com resultados experimentais.

1. Em primeiro lugar, vamos discutir a relação (41') a qual nos dá o inverso do tempo de relaxação para uma relação de dispersão de magnons linear. Esse é o caso dos metais terras raras pesados, Tb e Dy, para os quais tomaremos os seguintes dados<sup>(3), (25)</sup>:

$$V/N = 3.31 \times 10^{-23} \text{ cm}^3, \quad S = 3, \quad NJ(0) \sim .12 \text{ eV}$$

$$E_F = 7.3 \text{ eV}, \quad \epsilon_q \sim .25 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

Esses dados nos dão uma estimativa para  $T_1$  de  $28^\circ\text{K}$  e para  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}^0$  de:

$$. 52 \times 10^{10} T^2 G(Z_1) s^{-1}, \quad Z_1 = \frac{T_1}{T}$$

O gráfico da função  $G(Z_1)$  é mostrado na figura 5 para um intervalo de temperatura de  $1^\circ$  a  $40^\circ\text{K}$ , correspondendo ao comportamento qualitativo de  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)/T^2$  versus  $T$ . A forma desta curva é similar à curva  $F(Z_1)$ , rel. (41), obtida por Fert<sup>(16)</sup> para os metais ferromagnéticos Fe, Co e Ni.

A dependência de  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$  com  $T$ , é mostrada na figura 6, onde pode-se observar que a forma da curva  $T^2 G(Z_1)$  coincide com as curvas experimentais<sup>(2)</sup> no mesmo intervalo de temperatura.

Uma estimativa teórica para o Dy a  $T = 25^\circ\text{K}$ , nos dá:

$1/\tau_{\uparrow\downarrow}^0 = .7 \times 10^{13} s^{-1}$ , enquanto o valor experimental<sup>(2)</sup> é da ordem de  $1.3 \times 10^{13} s^{-1}$ .

Por outro lado, para os metais Gd, Ho, Er e Tm o tempo de relaxação é dado pela rel. (42). Usando os mesmos dados anteriores e considerando tentativamente uma relação de dispersão do tipo  $\epsilon_q = Aq^{1/2}$  encontramos para  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}^0$  o valor:

$$. 7 \times 10^7 T^4 H(Z_1) s^{-1}$$

Nas figuras 5 e 6 estão representados os gráficos  $H(Z_1)$  e  $T^4 H(Z_1)$  correspondendo, respectivamente ao comportamento qualitativo de  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)/T^4$  e  $\rho_{\uparrow\downarrow}(T)$  versus  $T$ . A uma temperatura  $T = 25^\circ\text{K}$  o valor teórico obtido para o Tm é  $7 \times 10^{13} s^{-1}$  enquanto o valor experimental é aproximadamente  $9 \times 10^{13} s^{-1}$  (2).

Essas discrepâncias podem ser originadas devido a anisotropia magnética entre o eixo hexagonal e o plano basal presente em todas as terras raras pesadas e que não foi considerada no presente estudo. Contudo levando em conta a simplicidade do modelo usado e o grau de precisão dos parâmetros envolvidos, podemos concluir que a concordância tanto na forma geral como na ordem de grandeza são

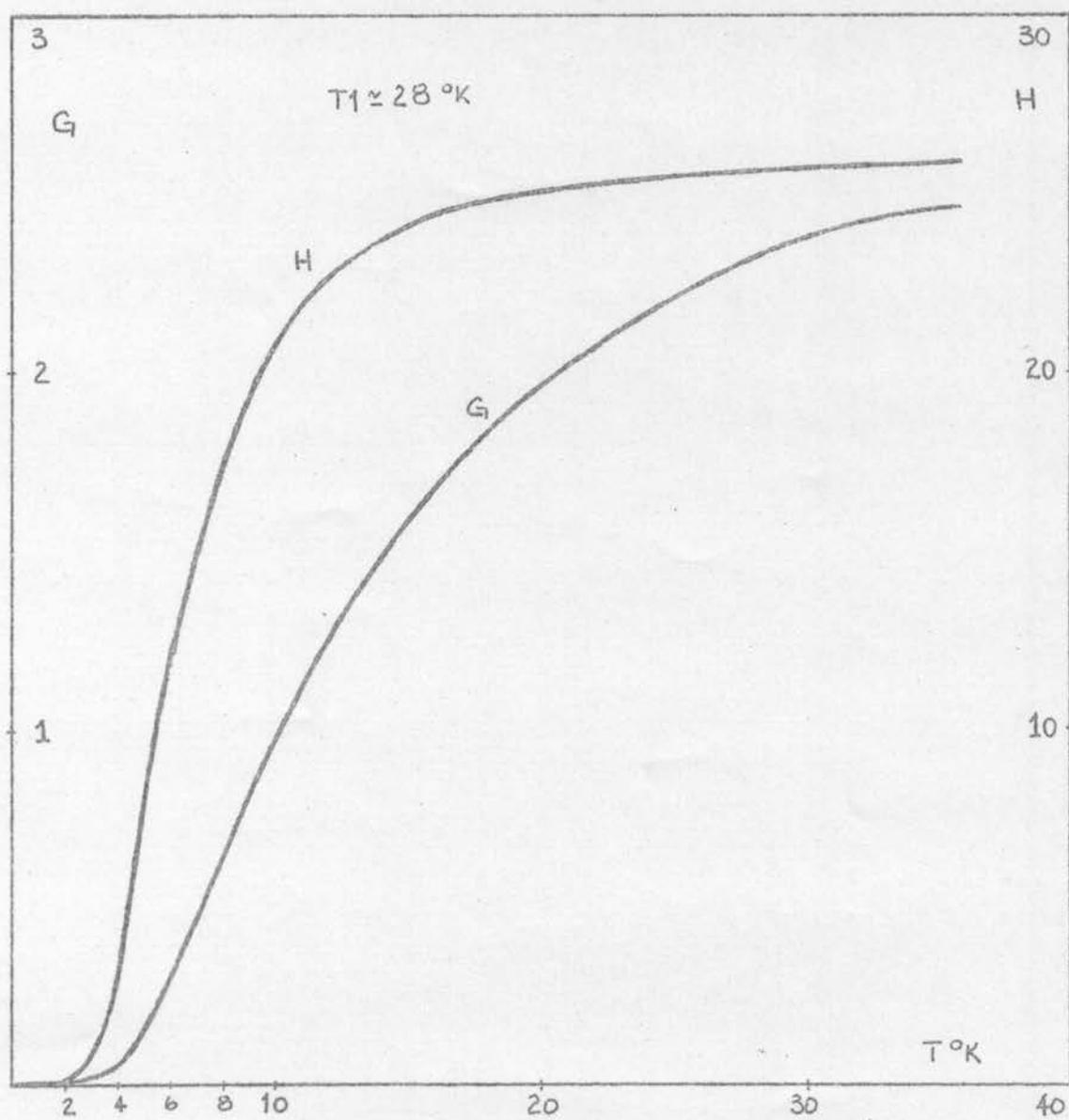


Fig. 5 - Funções  $G(Z_1)$  e  $H(Z_1)$  versus  $T$  ( $Z_1 = T_1/T$ ).

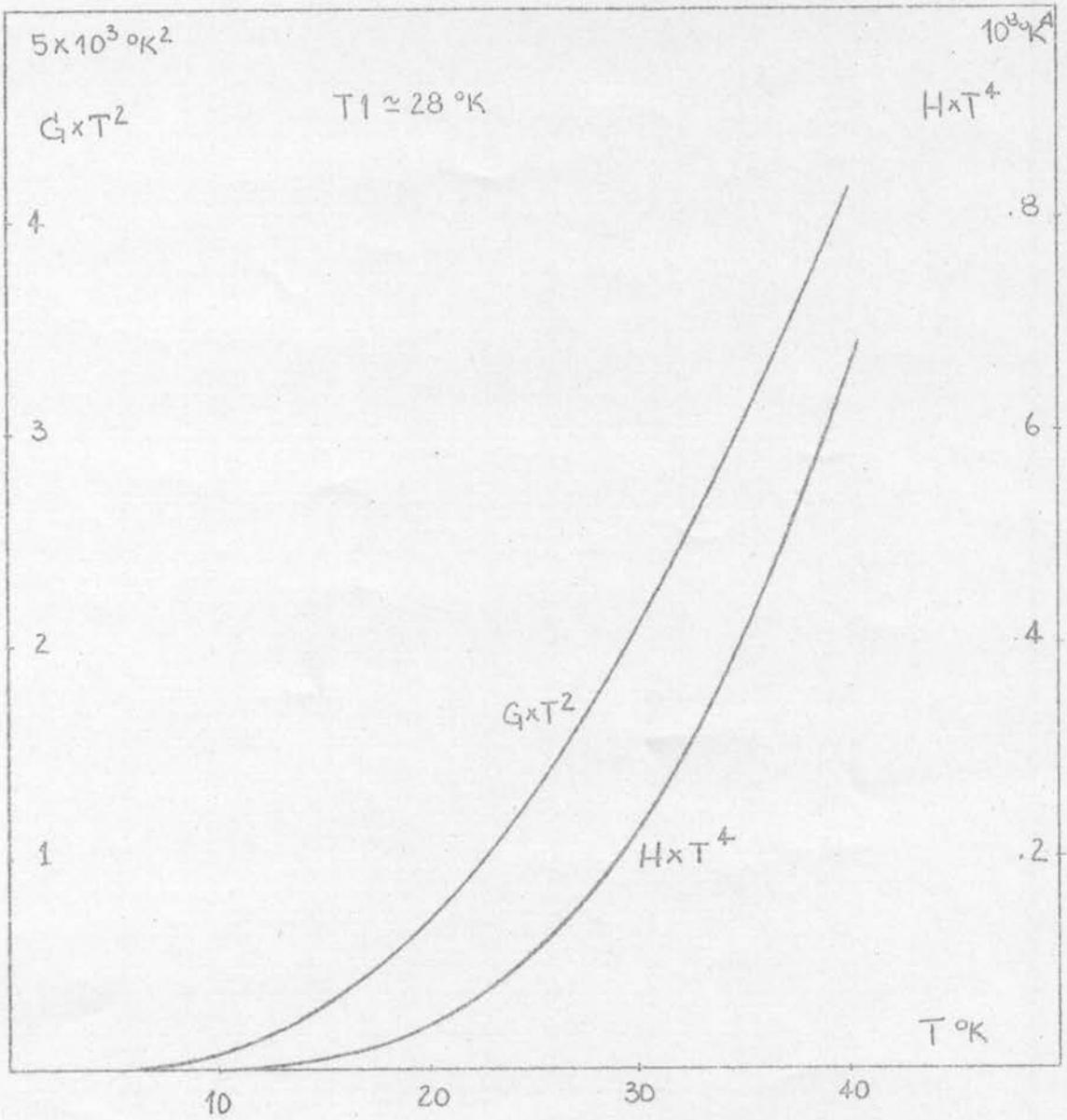


Fig. 6 - Funções  $T^2 G(z_1)$  e  $T^4 H(z_1)$  versus  $T$  ( $z_1 = T_1/T$ ).

satisfatórias. Isso significa que também para os metais terras raras pesados, a baixas temperaturas, os espalhamentos elétron-magnon parecem dominar a parte da resistividade elétrica dependente da temperatura.

2. O segundo aspecto abordado neste trabalho diz respeito a contribuição de impurezas na resistividade elétrica de matrizes magnéticas.

Pela relação (54):

$$\frac{1}{\tau_{N}} = (1-2c) \frac{1}{\tau_{N}^0} + \frac{1}{\tau_{N}^1}$$

podemos observar que a resistividade elétrica é dada como a soma de dois termos. O primeiro termo é o resultado de espalhamentos elétron-magnon com conservação do vetor de onda e apresenta a mesma dependência com a temperatura que o metal puro. O segundo termo representa a parte da resistividade associada ao espalhamento elétron-magnon para o qual a conservação do vetor de onda não é verificada. A dependência com a temperatura para esse termo é dado pelas relações (62) e (62').

Observa-se que para os ferromagnéticos do grupo 3d, a relação (62) prevê um comportamento com  $T^{3/2}$ . Esse comportamento foi observado por Kondorskii et al.<sup>(34)</sup> para ligas de Ni-Cu num intervalo de 4°K a 78°K.

Uma estimativa teórica para o Ni, usando os dados das referências (16) e (25) nos fornece a uma temperatura de  $T = 22^{\circ}\text{K}$ :

$$1/\tau_{\uparrow\downarrow} = 2.4 \times 10^{11} (1-2c) + 0.5 \times 10^{13} c$$

Para uma concentração de 10% de Cu,  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}$  é da ordem de  $0,74 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ , valor três vezes menor que o medido experimentalmente<sup>(34)</sup>.

Por outro lado, para as terras raras pesadas, a relação (62') apresenta uma dependência para  $1/\tau_{\uparrow\downarrow}^1$  com  $T^3$ . Uma estimati-

va para o Gd a 25°K nos dá:

$$1/\hat{\tau}_{\uparrow\downarrow} = 7 \times 10^{13}(1-2c) + 1.8 \times 10^{14}c$$

Este resultado quando comparado com o valor obtido por Mellon e Legvold<sup>(35)</sup> para a liga Gd-Th<sub>0.10</sub> é pouco mais que duas vezes menor. Contudo, devemos salientar que não encontramos na literatura uma investigação mais rigorosa sobre o comportamento da resistividade elétrica de ligas dilutas de terras raras pesadas com impurezas não magnéticas, a baixas temperaturas. Assim, para verificar a dependência da resistividade com T<sup>3</sup> para esses metais, sugere-se a realização de um estudo experimental nesse limite de temperatura.

Finalmente, é possível concluir dos resultados acima que o acréscimo de impurezas, quando em baixas concentrações não altera o caráter dominante dos espalhamentos elétrons-magnons.

## REFERÊNCIAS

- (1) J.M.Ziman - Electrons and Phonons, Oxford (1960).
- (2) N.V.Volkenshtein, V.P.Dyakina, V.E.Startsev - Phys.Stat.Sol.  
(b) 57, 9 (1973).
- (3) K.N.R.Taylor, M.I.Darby - Physics of Rare Earth Solids,  
Chapman and Hall (1972).
- (4) N.J.Mott, H.Jones - The Theory of Properties of Metals and  
Alloys - Dover (1936).
- (5) N.J.Mott - Adv.Phys. 13, 51 (1964).
- (6) C.Zener - Phys.Rev. 81, 440 (1951).
- (7) T.Kasuya - Prog.Theor.Physics 16, 1, 45 (1956).
- (8) T.Kasuya - Prog.Theor.Physics 16, 58 (1956).
- (9) W.G.Baber - Proc.Roy.Soc. A158, 383 (1937).
- (10) J.Appel - Phil.Mag. 90, 1071 (1963).
- (11) S.B.Woods, G.K.White - Phil.Trans.Roy.Soc. (London) A251,  
273 (1959).
- (12) R.J.Weiss, A.S.Marotta - J.Phys.Chem.Sol. 9, 302 (1959).
- (13) J.A.Campbell, A.Fert, A.R.Pomeroy - Phil.Mag. 15, 977 (1967).
- (14) A.Gomes - J.Phys.Chem.Sol. 27, 451 (1966).
- (15) A.Bouquard, E.Daniel, A.Fert - Phys.Lett. 26A, 260 (1968).
- (16) A.Fert - J.Phys. C2, 1784 (1969).
- (17) T.Farrel, D.Greig - J.Phys C1, 1359 (1968).
- (18) A.Fert, J.A.Campbell - Phys.Rev.Letters 21, 1190 (1968).
- (19) S.Arajs, F.C.Schwerer, R.M.Fisher - Phys.Stat.Sol. 33, 731 (1969).
- (20) J.Durand, F.Gautier - J.Phys.Chem.Sol. 31, 2773 (1970).
- (21) F.C.Schwerer, J.W.Conroy - J.Phys. F1, 877 (1971).
- (22) B.Loegel, F.Gautier - J.Phys.Chem.Sol. 32, 2723 (1971).
- (23) J.Mannari - Prog.Theor.Phys. 22, 335 (1959).
- (24) D.L.Mills, P.Lederer - J.Phys.Chem.Sol. 27, 1805 (1966).
- (25) D.A.Goodings - Phys.Rev. 132, 542 (1963)

- (26) F.Keffer - Encyclopedia of Physics, XVIII/2 (1966).
- (27) A.S.Davidov - Quantum Mechanics.
- (28) R.M.White - Quantum Theory of Magnetism, Mc Graw Hill.
- (29) W.Gröbner, N.Hofreiter - Integraltafel II (1966).
- (30) A.Yoshimori - J.Phys.Soc.Japan 14, 807 (1959).
- (31) T.A.Kaplan - Phys.Rev. 124, 329 (1961).
- (32) R.V.Colvin, S.Arajs - Phys.Status Solidi 4, 37 (1964).
- (33) A.Aveline - Tese de Mestrado (1973).
- (34) E.J.Kondorskii, O.S.Galkina, L.A.Chernikova - Sov.Phys.Jetp.  
34, 5 (1958).
- (35) D.W.Mellon, S.Levgold - J.of Appl.Phys. 42, 4 (1971).