

# PENURUNAN KONFIGURASI MOMEN MAGNETIK INCOMMENSURATE $CeCu_{5,5}Au_{0,5}$ DENGAN VEKTOR PROPAGASI $Q = (Q_x, 0, 0)$

Agus Purwanto

Puslitbang Iptek Bahan (P3IB)-BATAN  
Kawasan Puspipstek, Serpong, Tangerang 15314

## ABSTRAK

**PENURUNAN KONFIGURASI MOMEN MAGNETIK INCOMMENSURATE  $CeCu_{5,5}Au_{0,5}$  DENGAN VEKTOR PROPAGASI  $Q = (Q_x, 0, 0)$ .** Telah dilakukan penurunan konfigurasi momen magnetik yang mungkin muncul dari paduan  $CeCu_{5,5}Au_{0,5}$  pada fasa antiferromagnetik *incommensurate* temperatur rendah dengan vector gelombang magnetik  $(q_x, 0, 0)$ . Paduan tersebut membentuk kristal ortorombik bertipe struktur  $CeCu_6$  dengan grup ruang *Pnma* dan mengalami transisi magnetik pada suhu 1,07 K. Analisis, yang dilakukan dengan teori representasi, terutama dilakukan untuk membahas konfigurasi dengan modulasi sinusoidal. Hasilnya adalah empat konfigurasi dengan vektor propagasi gelombang magnetik searah dengan sumbu-*a*, yaitu: dua konfigurasi dengan arah momen sejajar sumbu-*b* dan 2 konfigurasi lain dengan arah momen pada bidang *ab*.

**Kata kunci :** Momen magnetik *incommensurate*,  $CeCu_{5,5}Au_{0,5}$ , vektor gelombang magnetik

## ABSTRACT

**DERIVATION OF INCOMMENSURATE MAGNETIC MOMENT CONFIGURATION ON  $CeCu_{5,5}Au_{0,5}$  WITH PROPAGATION VECTOR  $Q = (Q_x, 0, 0)$ .** We report on possible magnetic moment configurations of  $CeCu_{5,5}Au_{0,5}$  in its low-temperature incommensurate antiferromagnetic phase with  $q=(q_x, 0, 0)$ . The compound crystallizes in the orthorhombic  $CeCu_6$  structure type with the *Pnma* space group and undergoes magnetic transition at 1.07K. The analysis, done with the representation theory, was performed specifically for sinusoidally modulated configurations. The results are four configurations with the magnetic wave propagation vector along the *a*-axis, i.e; two possible configurations with moment directions parallel to the *b*-axis and 2 other configurations with moment directions in the *ab*-plane.

**Key words :** incommensurate magnetic moment,  $CeCu_{5,5}Au_{0,5}$ , magnetic wave vector

## PENDAHULUAN

Berbagai penelitian pada paduan  $CeCu_{6-x}M_x$  ( $M = Au, Ag, Pd, Pt, Ni, In$ ) telah banyak dilakukan untuk memahami modifikasi interaksi Kondo dan hilangnya keadaan koheren dari  $CeCu_6$  [1,2]. Ketika  $x = 0$ , sifat seperti kapasitas panas mengikuti konsep cairan Fermi, namun untuk  $M=Au$  dengan  $x > 0.1$ , sifat tersebut mengikuti cairan Non-Fermi [3]. Paduan  $CeCu_6$  *heavy-fermion* yang tidak menunjukkan struktur magnetik paling tidak sampai suhu 5mK [4,5], menjadi antiferromagnetik ketika dipadu dengan Au atau Ag [6,7].

Pengamatan struktur *incommensurate* dengan  $q = (0,59;0;0)$  pertama kali dilaporkan berdasarkan cuplikan serbuk [8]. Walaupun pengamatan intensif telah dilakukan mengenai struktur magnetik inkomensurat  $CeCu_{6-x}Au_x$  [9,10] dan pengukuran makroskopik menunjukkan struktur antiferromagnetik [9], pembahasan mengenai konfigurasi momen magnetik berdasarkan pada batasan simetri belum dilakukan dalam literatur.

Pada makalah ini, konfigurasi momen magnetik yang mungkin muncul untuk  $CeCu_{5,5}Au_{0,5}$  berdasarkan teori grup (representasi) akan dilaporkan. Penurunan akan

dimulai dari transformasi momen magnetik akibat simetri yang ada pada kristal berdasarkan vektor propagasi magnetik  $q = (q_x, 0, 0)$  dengan  $q_x \neq 0$ . Sejalan dengan itu, simetri kristal juga diaplikasikan pada representasi *irreducible* yang relevan. Setelah itu, operator proyeksi digunakan terhadap hasil dari transformasi pada momen dan transformasi pada representasi tersebut. Hasilnya merupakan vektor basis yang segera dapat diinterpretasikan dalam kisi langsung (*direct lattice*) dan digunakan sebagai model struktur magnetik.

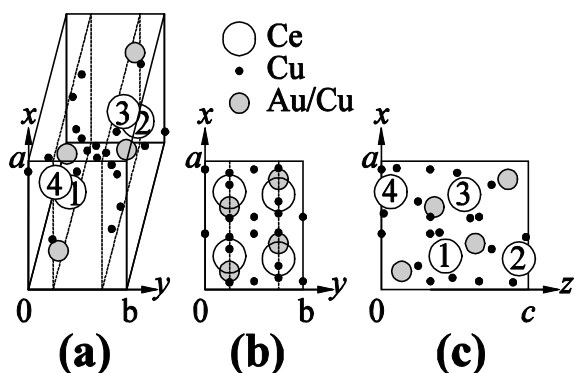
Penurunan secara teoritis ini sangat berguna untuk menghasilkan model-model struktur magnetik yang kemudian dapat digunakan dalam analisis data difraksi magnetik dan meminimalkan faktor kesalahan yang timbul akibat eksperimen.

## LANDASAN PENURUNAN KONFIGURASI MOMEN MAGNETIK

Penurunan konfigurasi momen magnetik dimulai dari informasi mengenai struktur kristal yang ditunjukkan

pada Gambar 1. Gambar 1(a) menunjukkan skema sel satuan yang mengandung empat atom Ce, 20 atom Cu dan 4 atom Au/Cu (*disordered*). Gambar 1(b) dan 1(c) masing-masing menunjukkan proyeksi struktur tersebut pada bidang-*ab* dan *ac*. Pada Gambar 1(a) dan (b) terlihat bahwa atom yang membawa informasi magnetik, yaitu atom Ce, berada pada bidang cermin dengan arah bidang cermin sejajar sumbu-*b*.

Analisis simetri sederhana untuk momen dengan posisi atom berada tepat pada simetri cermin akan menghasilkan susunan momen dengan arah sejajar dengan arah bidang cermin atau susunan momen pada bidang cermin tersebut.



Gambar 1. Struktur kristalografi secara (a) skematik, (b) proyeksi pada bidang a-b dan (c) proyeksi pada bidang-ac. Atom Cerium terletak pada bidang cermin yang ditunjukkan dengan garis terputus dan atom tersebut diberi label untuk analisis lebih lanjut. Ukuran atom dan sel satuan tidak digambarkan sesuai skala [11].

## PENURUNAN DENGAN TEORI REPRESENTASI

Teori representasi [12] digunakan untuk secara sistematis menghasilkan struktur magnetik yang mungkin sesuai dengan batasan simetri magnetik yang membuat vektor propagasi gelombang magnetik *q* (dalam daerah Brillouin pertama) tetap *invariant*. Jumlah simetri magnetik selalu kurang dibandingkan dengan simetri kristal. Dalam teori representasi, simetri magnetik diwakili oleh representasi yang *irreducible*.

Ada empat simetri yang tetap membuat  $q = (q_x, 0, 0)$  *invariant* dalam group ruang *Pnma*, yaitu [13]:

1. Simetri identitas (*e*),
2. Simetri sekrup dengan sumbu sekrup sejajar arah *a* yang terletak pada  $(x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) (2_{1x})$ ,
3. Simetri cermin dengan bidang pada  $(x, \frac{1}{4}, z)$  yang tegak lurus terhadap sumbu-*b* (*m*),
4. Simetri glide-*a* pada  $(x, y, \frac{1}{4})$  tegak lurus terhadap sumbu-*c* (*a*).

Berikut ini adalah penjelasan dari keempat simetri tersebut dengan memperhatikan bahwa momen magnetik adalah vektor aksial dimana yang ditransformasikan bukan arah momen melainkan elektron yang mengakibatkan arah momen yang bersangkutan [14].

Simetri identitas selalu ada dalam setiap grup dan hasil transformasi dengan menggunakan simetri ini selalu akan menghasilkan hasil yang sama dengan sebelum dilakukannya transformasi dengan simetri identitas. Simetri sekrup  $2_{1x}$  terdiri dari simetri rotasi lipat dua dengan sumbu sejajar arah *a* dan translasi sejajar arah *a*. Rotasi dengan sumbu sejajar arah *a* akan berakibat membaliknyanya arah momen yang tegak lurus dengan arah *a*. Translasi tidak akan merubah arah momen. Simetri cermin sejajar arah *b* akan membalik momen yang mempunyai arah tegak lurus bidang cermin tersebut. Sebagai catatan, hal ini berlawanan dengan transformasi pada vektor polar dimana transformasi dilakukan pada arah vektor (bukan penyebab arah vektor). Simetri glide terdiri dari simetri cermin dan translasi. Seperti telah disinggung sebelumnya, translasi tidak mempunyai efek pada arah momen dan simetri cermin akan membalik arah momen yang berarah tegak lurus bidang cermin. Karenanya, simetri glide tegak lurus terhadap arah *c* akan membalik arah momen yang sejajar dengan arah *a* dan *b*.

Lebih lanjut, transformasi momen magnetik tidak hanya melibatkan transformasi arah momen, namun juga melibatkan transformasi nomor atom.

Secara singkat, dapat dikatakan bahwa transformasi total (berukuran  $(12 \times 12)$ ) merupakan *direct product* dari transformasi arah momen (berukuran  $(3 \times 3)$ ) dengan transformasi nomor atom (berukuran  $(4 \times 4)$ ).

Tabel 1. Transformasi Momen Magnetik

	<i>e</i>	$2_{1x}$	<i>m</i>	<i>a</i>
$m_{1x}$	$m_{1x}$	$m_{4x}$	$-m_{1x}$	$-m_{4x}$
$m_{2x}$	$m_{2x}$	$m_{3x}$	$-m_{2x}$	$-m_{3x}$
$m_{3x}$	$m_{3x}$	$m_{2x}$	$-m_{3x}$	$-m_{2x}$
$m_{4x}$	$m_{4x}$	$m_{1x}$	$-m_{4x}$	$-m_{1x}$
$m_{1y}$	$m_{1y}$	$-m_{4y}$	$m_{1y}$	$-m_{4y}$
$m_{2y}$	$m_{2y}$	$-m_{3y}$	$m_{2y}$	$-m_{3y}$
$m_{3y}$	$m_{3y}$	$-m_{2y}$	$m_{3y}$	$-m_{2y}$
$m_{4y}$	$m_{4y}$	$-m_{1y}$	$m_{4y}$	$-m_{1y}$
$m_{1z}$	$m_{1z}$	$-m_{4z}$	$-m_{1z}$	$m_{4z}$
$m_{2z}$	$m_{2z}$	$-m_{3z}$	$-m_{2z}$	$m_{3z}$
$m_{3z}$	$m_{3z}$	$-m_{2z}$	$-m_{3z}$	$m_{2z}$
$m_{4z}$	$m_{4z}$	$-m_{1z}$	$-m_{4z}$	$m_{1z}$

Setelah mempertimbangkan keempat simetri magnetik tersebut di atas dan melakukan perkalian matriks sederhana untuk memproses transformasi yang diperlukan, efek dari operasi simetri pada momen dapat dirangkum pada Tabel 1. Kolom paling kiri menunjukkan momen magnetik  $m_{i\alpha}$  untuk atom ke-*i* dengan arah  $\hat{a}$  sebelum ditransformasikan. Kolom-kolom berikutnya berisikan momen magnetik setelah ditransformasikan oleh

simetri dengan simbol yang tertera pada baris teratas dari Tabel 1. Terlihat pada Tabel 1 bahwa simetri  $2_{1x}$  dan  $a$  hanya menghubungkan atom 1 dengan atom 4 (demikian pula untuk atom 3 dan 2). Hal ini akan mengakibatkan batasan simetri muncul hanya pada pada atom 1 dengan atom 4 (demikian pula untuk atom 3 dan 2), dan tidak ada batasan simetri untuk atom 1 dengan atom 3 atau atom 2 (demikian pula untuk atom 4 dengan atom 3 atau atom 2).

Dengan memperhatikan kembali Gambar 1 yang menunjukkan bahwa atom 1 dan atom 4 berada pada bidang cermin yang sama, maka dapat dikatakan bahwa Tabel 1 memberikan batasan simetri hanya untuk atom-atom yang terletak pada bidang cermin (searah sumbu  $b$ ) yang sama.

Tabel 2. Representasi *irreducible* untuk Pnma dengan  $q = (q_x, 0, 0)$  [15]

	$e$	$2_{1x}$	$m$	$A$
$\Gamma_1$	1	$\zeta$	1	Z
$\Gamma_2$	1	$\zeta$	-1	$-\zeta$
$\Gamma_3$	1	$-\zeta$	1	$-\zeta$
$\Gamma_4$	1	$-\zeta$	-1	Z

Sebagaimana telah disinggung sebelumnya, tahapan berikutnya berkaitan dengan representasi dari masing-masing simetri magnetik yang telah dibahas di atas. Vektor gelombang  $q = (q_x, 0, 0)$  bersifat *invariant* terhadap keempat simetri di atas dan ditampilkan kembali dalam baris pertama pada Tabel 2 bersama dengan representasi *irreducible* yang bersangkutan, yaitu  $\Gamma_i$  ( $i = 1 - 4$ ).

Representasi  $\Gamma$  menggambarkan sifat transformasi dengan  $4(\text{atom}) \times 3(\text{komponen cartesian}) = 12$  komponen total untuk masing-masing simetri dari keempat simetri magnetik yang telah dibahas di atas. Masing-masing simetri tersebut merupakan elemen dari grup ruang  $G$  yang dapat dinyatakan dengan matriks representasi *reducible* berukuran  $(12 \times 12)$ . Berdasarkan karakter representasi *reducible* untuk keempat simetri tersebut:

$$\begin{aligned} \chi^\Gamma(e) &= 12 \\ \chi^\Gamma(2_{1x}) &= 0 \\ &= \chi^\Gamma(a) \\ \chi^\Gamma(m) &= -4 \end{aligned}$$

kita peroleh dekomposisi representasi *reducible*  $\Gamma$  menjadi empat representasi *irreducible*  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3,$  dan  $\Gamma_4$  sesuai dengan persamaan:

$$\Gamma = 2 \Gamma_1 + 4 \Gamma_2 + 2 \Gamma_3 + 4 \Gamma_4 \quad (1)$$

Terlihat bahwa semua representasi *irreducible*  $\Gamma_i$  yang tertera pada Tabel 2 muncul, sehingga seluruh representasi *irreducible* tersebut akan mewakili satu model konfigurasi momen magnetik.

Tahap berikutnya adalah memproyeksikan representasi *irreducible* tersebut pada hasil transformasi momen magnetik yang tertera pada Tabel 1 sehingga menghasilkan vektor basis untuk masing-masing representasi *irreducible*. Vektor basis untuk masing-masing representasi *irreducible* tersebut adalah:

$$\Gamma_1 = (m_y - \zeta m_b) + (m_b - \zeta m_y) \quad (2)$$

$$\Gamma_2 = (m_x + \zeta m_c) + (m_c - \zeta m_x) + (m_b - \zeta m_b) + (m_b - \zeta m_b) \quad (3)$$

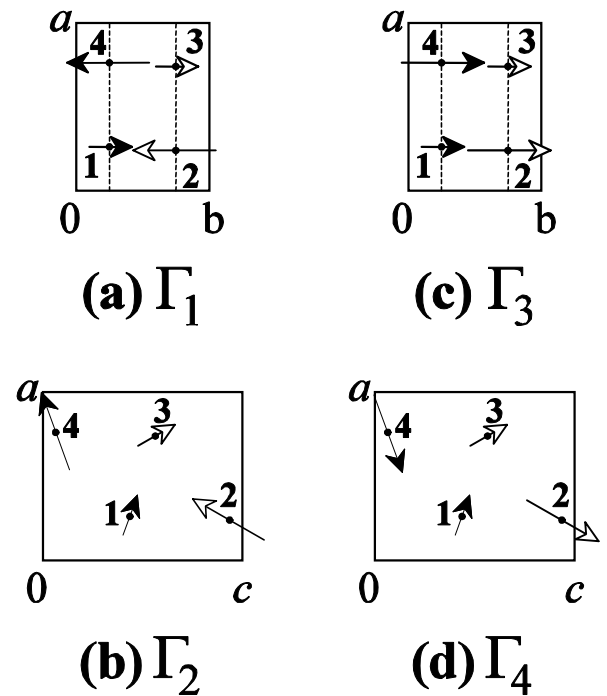
$$\Gamma_3 = (m_y + \zeta m_b) + (m_b + \zeta m_y) \quad (4)$$

$$\Gamma_4 = (m_x - \zeta m_c) + (m_c + \zeta m_x) + (m_b - \zeta m_b) + (m_b + \zeta m_b) \quad (5)$$

Vektor basis di atas dapat diinterpretasikan sebagaimana tertera pada Tabel 3 yang diperjelas dengan Gambar 2.

Tabel 3. Empat konfigurasi momen diturunkan dari teori representasi dengan  $\zeta = \exp(-i \pi q_x)$

	$\Gamma_1$ komponen y	$\Gamma_2$ komponen xz	$\Gamma_3$ komponen y	$\Gamma_4$ komponen xz
komponen x	-	$M_x = \zeta m_x$	-	$m_x = -\zeta m_x$
	-	$M_x = \zeta m_x$	-	$m_x = -\zeta m_x$
komponen y	$m_y = -\zeta m_y$	-	$m_y = \zeta m_y$	-
	$m_y = -\zeta m_y$	-	$m_y = \zeta m_y$	-
komponen z	-	$m_z = -\zeta m_z$	-	$m_z = \zeta m_z$
	-	$m_z = -\zeta m_z$	-	$m_z = \zeta m_z$



Gambar 2. Empat konfigurasi momen magnetik dari atom Ce sejajar dengan sumbu- $b$  ( $\Gamma_1$  dan  $\Gamma_3$ ) dan dalam bidang- $ac$  ( $\Gamma_2$  dan  $\Gamma_4$ ) untuk  $CeCu_{5.5}Au_{0.5}$  dengan  $q = (q_x, 0, 0)$  berdasarkan teori representasi. Momen untuk atom 1 dan 4 digambarkan sedikit berbeda dibandingkan dengan untuk atom 3 dan 2, untuk menunjukkan bahwa hubungan yang sama berlaku antara momen dari atom 1,4 dan atom 3,2; namun tidak ada pembatasan untuk momen dari atom 1,3 atau 4,2. Panjang panah untuk atom 1 dan 4 (demikian pula untuk 3 dan 2) tidak digambarkan berukuran sama karena harga  $q_x$  tidak nol.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Teori grup terbukti berguna untuk menurunkan kemungkinan konfigurasi struktur magnet untuk vector gelombang magnetik yang *incommensurate*, dimana perbandingan sel satuan kristal dengan sel satuan magnetik tidak dapat dinyatakan sebagai bilangan rasional. Dengan teori ini, atom-atom magnetik yang perlu dipertimbangkan hanyalah atom-atom yang terletak pada sel satuan kristal dan dengan vector gelombang magnetik  $q$  terletak pada daerah *Brillouin* pertama. Sebagai perbandingan, teknik penurunan kemungkinan konfigurasi lainnya yang didasarkan pada analisis group ruang magnetik berkemampuan terbatas hanya untuk harga  $|q|$  yang *incommensurate*. Keterbatasan lebih lanjut dari analisis ini adalah bahwa atom-atom yang perlu diperhatikan adalah atom-atom yang terletak pada sel satuan magnetik yang dimungkinkan jauh lebih besar daripada sel satuan kristal untuk harga  $|q|$  yang kecil namun *commensurate*. Perbandingan lebih lanjut, jika teknik penurunan secara sistematis dengan batasan simetri tidak digunakan, konfigurasi yang muncul dapat terpengaruh oleh *noise* ataupun kesalahan sistematis yang mungkin muncul pada eksperimen.

Teori representasi menghasilkan konfigurasi momen magnetik dengan arah momen tegak lurus atau sejajar terhadap bidang cermin. Hal ini sesuai dengan analisis simetri sederhana untuk vektor aksial dimana arah momen magnetik untuk atom yang berada pada bidang cermin hanya mempunyai dua kemungkinan, yaitu tegak lurus atau sejajar terhadap bidang cermin tersebut.

Hasil lain dari analisis berdasarkan teori representasi adalah munculnya kombinasi *coupling* tambahan antar atom sehingga terdapat pembalikan arah pada momen yang bersangkutan, namun besaran momen magnetik tetap beresolusi secara sinusoidal. Adanya *coupling* tambahan ini adalah murni berasal dari teori representasi, namun tidak merusak pembatasan simetri yang ada.

## KESIMPULAN

Berbagai konfigurasi momen magnetik *incommensurate* yang mungkin muncul pada bahan  $CeCu_{5.5}Au_{0.5}$  dengan  $q = (q_x, 0, 0)$  telah diturunkan secara sistematis berdasarkan teori representasi. Hasilnya adalah dua konfigurasi sinusoidal dengan arah momen sejajar sumbu- $b$  dan dua lainnya dengan momen terletak pada bidang- $ab$  yang berimpit dengan bidang cermin yang ada pada sel satuan kristal ini. Arah propagasi gelombang sinusoidal tersebut adalah sejajar dengan sumbu- $a$ . Berbagai konfigurasi tersebut merupakan model dengan parameter yang dapat diinputkan pada program komputer dengan keluaran berupa intensitas. Intensitas perhitungan tersebut dapat dicocokkan dengan intensitas yang diperoleh dari eksperimen sehingga menghasilkan parameter magnetik berikut dengan perkiraan

eksperimental *error* yang paling optimal.

## UCAPAN TERIMAKASIH

Penulis berterimakasih kepada Y. Morii dan N. Minakawa dari JAERI, Jepang atas kesempatan penelitian di JAERI, Jepang. Penulis juga berterimakasih kepada K. Kakurai (University of Tokyo, Jepang) dan R. A. Robinson (ANSTO, Australia) yang menunjukkan permasalahan pada penelitian ini.

## DAFTARACUAN

- [1]. M. SIECK, C. SPECK, M. WAFFERNESCHMIDT, S. MOCK and H. V. LOHNEISEN, *Physica B* **223 & 224**, (1996) 325 – 328.
- [2]. O. ISNARD, J. PIERRE, D. FRUCHART, L. P. ROMAQA and R. V. SKOLOZDRA, *Solid State Communications* **113** (2000) 335 – 340.
- [3]. H. V. LOHNEISEN, F. HUSTER, S. MOCK, A. NEUBERT, T. PIETRUS, M. SIECK, O. STOCKERT and M. WAFFERNESCHMIDT, *Physica B* **230-232** (1997) 550-556.
- [4]. E. A. SCHUBERTH, et.al., *Phys. Rev. B* **51** (1995) R12892.
- [5]. L. POLLACK, et.al., *Phys. Rev. B* **52** (1995) R15707
- [6]. A. GERMANN, A. K. NIGAM, J. DUTZI, A. SCHROEDER, H. V. LOHNEISEN, *Journal de Physique* **49** (1988) C8/755
- [7]. K. GANGOPADHYAY, et.al., *Phys. Rev. B* **38** (1988) 2603.
- [8]. T. CHATTOPADHYAY, et.al., *Z. Phys. B* **80** (1990) 159.
- [9]. H. V. LOHNEISEN, A. NEUBERT, T. PIETRUS, A. SCHROEDER, O. STOCKERT, U. TUTSCH, M. LOEWENHAUPT, A. ROSCH and P. WOLFFLE, *Eur. Phys. J. B* **5** (1998) 447-455.
- [10]. H. OKUMURA, K. KAKURAI, Y. YOSHIDA, Y. ONUKI and Y. ENDOH, *J. Magn. Magn. Mater.* **177 – 181** (1998) 405 – 406.
- [11]. H. OKUMURA, *kommunikasi probadi*.
- [12]. J. ROSSAT-MIGNOD, *Neutron Scattering*, **XXIII** (C), Academic Press, Inc., (1987), 69 – 157.
- [13]. *International tables for crystallography*, Ed. T. Hahn (International Union of Crystallography, (1987), **Vol. A**.
- [14]. G. ARFKEN, *Mathematical methods for physicists*, Academic Press, Inc., (1985), 128-135.
- [15]. O.V. KOVALEV, *Representations of the crystallographic space groups*, Gordon and Breach Science Publishers, (1993).