

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI

Facultad de Ciencias

Instituto de Física "*Manuel Sandoval Vallarta*"

**Anisotropía Magnética en Monocapas de
Metales de Transición 3d: Cálculo Autoconsistente en
el Espacio Real utilizando el Método de Recursión.**

TESIS que para obtener el título de

Maestro en Ciencias (Física)

presenta

Armando Encinas Oropesa

San Luis Potosí, S.L.P.

29 de Junio de 1995

Dedicatoria

A mis Padres, la Tichi y el Cuco, por todo su amor, su dedicación a nuestra familia y por todo su apoyo.

A mis hermanos, Adriana y Alberto, por su ejemplo, su cariño y su amistad.

Agradecimientos

Al Dr. Jesús Dorantes Dávila por haber dirigido este trabajo.

Al CONACyT por haber brindado el apoyo para hacerlo.

ACTA N° 41

Exámen de Grado
de Maestria
en Ciencias.Fecha
29 de Junio
1995Nombre
Armando
Encinas OropesaESCUELA DE CIENCIAS
DIRECCION

En la ciudad de San Luis Potosí, S.L.P., a los veintinueve días del mes de junio de mil novecientos noventa y cinco, se reunieron en el Instituto de Física ante el Secretario General de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, los señores Jesús G. Dorantes Dávila, Faustino Aguilera Granja, José Mend Alcaraz, Manuel Mirabal García y Carlos Amador, todos ellos con el carácter de Jurado Calificador y con el propósito de celebrar el exámen de grado que para la Maestria en Ciencias (Física), sustentó el Fis. Armando Encinas Oropesa, de acuerdo y de conformidad a la disposición dictada por el Señor Rector de la Universidad, y en atención a que el sustentante comprobó legalmente haber realizado todas las estudios, que para obtener dicho grado exigió el Plan de estudios vigente, en la época en que el sustentante estudió. El exámen de grado comenzó a las 10:00 hrs. y terminó a las 12:00 hrs. del día y fecha antes mencionados. De conformidad con la votación que por escrutinio secreto hizo el H. Jurado Calificador, resultó el sustentante: -----
 — APROBADO POR UNANIMIDAD —

Para constancia se levantó la presente acta que firmaron los señores miembros del Jurado ante el Secretario de la Universidad que autoriza. Doy Fe.

J. Méndez y Juan Faustino Ag

A. G. Dorantes

G. G.

“...el tiempo pasa”

“... y no te puedo olvidar”

Contenido

Resumen	ii
Introducción	iii
1 Anisotropía Magnética	1
1.1 Generalidades	1
1.2 El acoplamiento espín-órbita	4
2 Teoría Electrónica de Sistemas de Baja Dimensionalidad de Metales de Transición 3d	8
2.1 El hamiltoniano de Hubbard	8
2.2 Cálculo de la energía de anisotropía magnética	13
3 Resultados	15
3.1 Convergencia de la fracción continua	16
3.2 Energía de anisotropía magnética en monocapas bcc y fcc	18
3.3 Más allá de la aproximación de corrimiento de intercambio constante	24
3.4 Validez de la teoría de perturbaciones	27
3.5 Papel de la Autoconsistencia	30
4 Conclusiones y Perspectivas	40
A El Método de Recursión de Haydock	44
Bibliografía	47

Resumen

En el presente trabajo se reporta un estudio sistemático de la Energía de Anisotropía Magnética (EAM) en monocapas de metales de transición (MT) $3d$. Para describir las propiedades electrónicas se ha utilizado un hamiltoniano tipo Hubbard de amarre fuerte, que nos permite tratar las interacciones de Coulomb, intercambio y el acoplamiento espín órbita (AEO) al mismo nivel electrónico. La energía electrónica, que depende de la dirección de la magnetización, se determina utilizando el método de recursión de Haydock. Para los cálculos se consideró la monocapa bcc (001) ajustada a los sistemas Fe/X (con X= Au,Cu). Con el fin de poder estudiar y cuantificar las tendencias de la EAM a lo largo de la serie $3d$, se realizó un estudio sistemático de ella en función de los parámetros relevantes del sistema, tales como: (i) el cambio en el entorno local, (ii) llenado de la banda d , y (iii) el parámetro de AEO. Como primer punto, se estableció el número mínimo de niveles que se deben considerar en la fracción continua para obtener resultados confiables y precisos. Enseguida, se procedió a remover la restricción de que el momento magnético esté necesariamente saturado. Los resultados obtenidos muestran que la EAM presenta tendencias muy regulares que, sin embargo, cambian drásticamente cuando se pierde la saturación de la magnetización. Al comparar estos resultados con aquellos obtenidos por la teoría de perturbaciones, se observó que, en general, la validez de este enfoque está restringida a que el sistema se encuentre en el régimen de intercambio fuerte. Los resultados anteriores sugirieron que el cálculo auto-consistente de la distribución de carga polarizada en espín debería ser importante. Por lo que se procedió, como último punto, a calcular la EAM realizando cálculos autoconsistentes. Al comparar estos resultados con aquellos obtenidos previamente, se encontró que existen diferencias notables tanto en los valores del momento magnético como de la EAM, con lo cual se pudo llegar a la conclusión de que en sistemas caracterizados por un corrimiento de intercambio débil, la autoconsistencia juega un papel fundamental tanto en las propiedades como en el cálculo preciso de la EAM. Posibles extensiones de este trabajo también son discutidas.

Introducción

En la actualidad, la ciencia de materiales representa una de las más importantes fuentes de tecnología. Novedosas técnicas de preparación de materiales, cada vez más complejos y con propiedades cada vez más específicas, han llevado al descubrimiento de nuevos fenómenos en prácticamente todas las áreas de investigación. La demanda de nuevas teorías capaces de explicar y predecir estos fenómenos es cada vez mayor. Una de las áreas que más ha experimentado un crecimiento explosivo durante los últimos años es la del magnetismo, particularmente en sistemas de baja dimensionalidad, como superficies, multicapas, cúmulos, etc., que han mostrado poseer un gran potencial de aplicabilidad en la elaboración de nuevas tecnologías, que van desde medios de grabación magnética de muy alta densidad hasta puntas para microscopios de tunelaje [1].

Por otro lado, los progresos considerables que se han logrado en los últimos años en la síntesis y caracterización experimental de materiales con estructuras artificiales han hecho patente que la anisotropía magnética es una de las propiedades magnéticas más básicas, más aún, resulta ser uno de los factores más fundamentales relacionado a un amplio espectro de fenómenos que se han observado recientemente. En particular, para sistemas de grabación de alto rendimiento, se requieren películas delgadas que posean propiedades anisotrópicas particulares, ya que, las técnicas de grabación perpendicular utiliza sistemas que tengan un eje fácil perpendicular al sustrato, mientras que la grabación longitudinal utiliza medios magnéticos con una dirección fácil paralela a este es decir, en el plano [2].

Experimentos recientes muestran que películas magnéticas muy delgadas de metales de transición $3d$ depositadas sobre un sustrato no magnético Co/X , Fe/X (donde X puede ser Au , Ag , Pd , Pt , Cu) [3] y recientemente Ni/Cu [4], exhiben anisotropía magnética perpendicular. Nuevos estudios *in situ* sobre la evolución de las propiedades magnéticas de estas películas delgadas durante su crecimiento epitaxial a bajas temperaturas han mostrado que el momento magnético, inicialmente perpendicular (paralelo) a la superficie, sufre una transición hacia el (fuera) plano, una vez que se alcanza un espesor crítico [5, 6, 7]. Un comportamiento análogo ha sido observado recientemente en multicapas de $\text{X}/\text{Fe}/\text{Y}$ y $\text{X}/\text{Co}/\text{Y}$ (X, Y Au , Ag , Pd , Pt , Cu) [8]. En otra serie de experimentos se estudiaron las propiedades

magnéticas de películas delgadas de Fe/Au(001) y Fe/Cu(001) [9], así como de Co/Pt, Co/Au y Co/Pd [10] como función de la temperatura. Los resultados mostraron que, en estos sistemas, se podía llevar a cabo una reorientación del momento magnético a una temperatura crítica T_r , menor que la de Curie. Posteriormente, Qiu *et al.* [11] estudiaron esta transición de la magnetización variando temperatura y grosor en películas ultradelgadas de Fe/Ag (001), a partir de donde se observó que la temperatura de inversión del momento magnético y la de Curie cambian como función del grosor de la película. Por otro lado, experimentos sobre las propiedades magnéticas de cúmulos pequeños de MT [12] han sugerido que, en estos sistemas, la EAM es mucho mayor que la del bulto e incluso que la observada en películas delgadas.

Por estas razones existe mucho interés por estudiar y entender los orígenes de la anisotropía y de los factores que la controlan. No obstante, a pesar de que existe una gran cantidad de trabajo experimental y teórico reportado, este último principalmente fenomenológico [13, 14], no existe una teoría electrónica que permita calcular, de manera precisa y confiable la EAM, ni identificar satisfactoriamente los mecanismos que están involucrados.

Una teoría electrónica es necesaria ya que la naturaleza misma de las propiedades magnéticas tan peculiares que caracterizan a los sistemas de baja dimensionalidad yace en la falta de simetría de estos sistemas y su efecto en las distribuciones electrónicas. El problema principal que surge al estudiar esta propiedad en sistemas que presentan magnetismo itinerante, como Fe, Co y Ni, es que la contribución responsable de la EAM, el acoplamiento espín-órbita (AEO), es mucho más pequeña que el resto de las energías electrónicas típicas, dadas por el ancho de banda W_d ($W_d \sim 5$ eV en MT), ésto, añadido a la falta de simetría, hace que el efecto sea muy pequeño y difícil de estudiar (la $EAM(Fe,Co,Ni) \sim 10^{-6} - 10^{-5}$ eV/átomo en el volumen y $10^{-3} - 10^{-2}$ eV/átomo en sistemas de baja dimensionalidad).

Desde el punto de vista teórico, el problema plantea serias dificultades que no han sido completamente resueltas. La sutileza del efecto y la simetría reducida de muestras reales limitan considerablemente el uso de los métodos de primeros principios, que requieren de un esfuerzo de cálculo que resulta prohibitivo, aún cuando se perfeccionen para aprovechar avances metodológicos recientes. Por otro lado, aprovechando que el efecto es muy pequeño, el problema también ha sido abordado considerando el AEO como una perturbación. Sin embargo, los cálculos más detallados están restringidos a monocapas suspendidas, y ya que es un modelo necesariamente sobresimplificado, su aplicabilidad a sistemas más realistas ha sido seriamente cuestionado por otros autores.

De lo anterior, es de considerable interés el desarrollo de métodos de estudio alternativos que sean más simples, adaptables a cualquier sistema y que guarden un grado aceptable de confiabilidad y de poder de predicción. Trabajando en esta dirección, Pick *et al.* [15],

han resuelto un hamiltoniano tipo amarre fuerte para monocapas mediante el método de recursión. Este modelo retiene la física necesaria para describir adecuadamente las propiedades magnéticas, además de que permite controlar con bastante libertad la precisión numérica y, debido a que dicho modelo está planteado siguiendo un enfoque local, presenta la virtud de no imponer restricciones sobre la simetría de la estructura del sistema. Los resultados obtenidos han mostrado que, cualitativamente, el modelo describe de manera adecuada las propiedades y tendencias de la EAM. En este trabajo [15], sin embargo, los resultados obtenidos están restringidos a sistemas en los cuales el momento magnético está saturado.

Pastor y colaboradores [16] recientemente han utilizado este mismo modelo para estudiar la anisotropía magnética en cúmulos pequeños de MT en términos de las propiedades estructurales de estos sistemas, el resultado más interesante que obtuvieron fue la fuerte dependencia de la EAM en el entorno local. En particular, observaron que cuando el sistema se contrae aumentando el ancho de banda este pierde su estado de saturación magnética. Las propiedades magnéticas anisotrópicas así obtenidas muestran un comportamiento muy distinto al predicho por la teoría de perturbaciones. Por lo anterior Pastor *et al.* señalan que la determinación autoconsistente de las propiedades magnéticas debe jugar un papel crucial en el cálculo confiable de la EAM en sistemas no periódicos.

En el caso de películas delgadas de MT los cambios en el entorno local podrían dar lugar a resultados análogos a los observados en cúmulos, ya que en ciertas circunstancias, la deposición del MT sobre un sustrato se puede obtener un sistema con momento magnético no saturado. En este caso se deben observar diferencias notables en las propiedades de la EAM, y por lo tanto es de esperar que la importancia de realizar cálculos verdaderamente autoconsistentes se haga evidente.

El objetivo de este trabajo es el de realizar un estudio sistemático de la anisotropía magnética en monocapas de MT considerando sistemas en los Regímenes de Intercambio Fuerte (RIF), Medio (RIM) y Débil (RID). Tomando en cuenta que, particularmente en el RID la determinación autoconsistente de las propiedades magnéticas juega un papel importante, se ha procedido, como primer punto, a estudiar las propiedades de convergencia de la fracción continua. Enseguida se ha introducido una aproximación apropiada para describir sistemas con corrimientos de intercambios débiles. En este punto se han realizado cálculos extensos de la EAM y otras propiedades magnéticas en función de los parámetros relevantes del sistema, tales como cambios en el entorno local, el llenado de la banda $3d$ y la magnitud del AEO (ξ). Finalmente se realizaron cálculos autoconsistentes, para buscar las diferencias con los resultados obtenidos previamente, y estimar qué tan considerables resultan estas diferencias.

El trabajo se ha dividido en cuatro capítulos. En el primero se ha dedicado una sección

para definir los conceptos físicos más relevantes utilizados, enseguida se expone lo referente al acoplamiento espín-órbita, su significado físico y el papel que juega éste en la aparición de la anisotropía. En un segundo capítulo se presenta la teoría electrónica con la cual se llevaron a cabo los cálculos. En el tercer capítulo se presentan y discuten los resultados obtenidos, para finalizar con un cuarto de conclusiones y perspectivas.

Capítulo 1

Anisotropía Magnética

1.1 Generalidades

La principal propiedad de un material ferromagnético, tal como Fe, Co y Ni, es la aparición de una magnetización espontánea M por debajo de la temperatura de Curie T_C . Heisenberg demostró que el ferromagnetismo tiene su origen en el principio de exclusión de Pauli, es decir, en el espín electrónico. Desde el punto de vista formal, la descripción del electrón se debe llevar a cabo en el contexto de la mecánica cuántica relativista. A pesar de esto, se ha observado que para una descripción teórica de las propiedades básicas de los materiales ferromagnéticos es suficiente utilizar mecánica cuántica *no-relativista*. Sin embargo, en esta descripción el espín se introduce *ad hoc* por lo que existe libertad absoluta para escoger la dirección de cuantización del espín; en otras palabras, usar mecánica cuántica *no-relativista* nos lleva a una descripción del ferromagnetismo en la cual la energía libre del sistema es independiente de la dirección de la magnetización, decimos entonces que es isotrópica. Esto está en contradicción con la experiencia, que nos dice que la magnetización por lo general yace en alguna dirección preferencial con respecto a los ejes cristalinos y/o la forma externa del cuerpo: esta propiedad se conoce como *anisotropía magnética*.

Para medir una propiedad física, como la anisotropía magnética, es necesario valerse de alguna cantidad que se pueda relacionar con dicha propiedad. En general, una cantidad muy significativa es la *energía de anisotropía magnética* (EAM). Para definir la EAM nos basamos en el siguiente experimento: imaginemos que tenemos un material ferromagnético y queremos determinar para que intensidad de campo magnético H la magnetización alcanza su valor de saturación M_S (valor máximo que alcanza la magnetización).

En la figura 1.1 se muestran las gráficas obtenidas al realizar este experimento en una muestra de Hierro. Como se puede apreciar, el valor de H para el cual se alcanza la saturación en la muestra, depende de la orientación relativa entre el campo aplicado y la muestra.

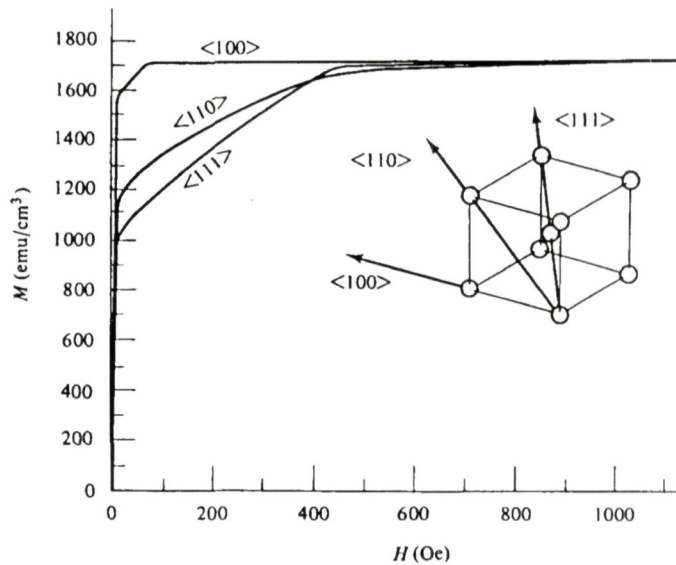


Figura 1.1 Curvas de magnetización para monocristales de Hierro [13].

Estas mediciones muestran que, para el hierro, se puede alcanzar la saturación con campos relativamente débiles en la dirección $\langle 100 \rangle$, que de acuerdo a esto se llama *dirección fácil*. De manera similar, la dirección en la cual resulta más difícil saturar la muestra es la $\langle 111 \rangle$; se denomina *dirección difícil*. En las figuras 1.2 y 1.3 respectivamente, se muestran los resultados análogos para muestras de Níquel y de Cobalto.

Se define la energía de anisotropía magnética como la energía necesaria para rotar la magnetización desde una dirección de baja energía (*dirección fácil*) hacia una de mayor energía (*dirección difícil*). Según la definición, la EAM físicamente nos indica la dirección preferencial que adopta el momento magnético con respecto al sistema cristalino y, por otro lado, su magnitud da una medida de la estabilidad del momento magnético. Esta contribución es típicamente del orden de 10^{-6} a 10^{-3} eV/átomo. Esta energía es entonces una corrección muy pequeña a la energía magnética total; de hecho, surge de correcciones relativistas al hamiltoniano, las cuales rompen la invarianza rotacional con respecto al eje de cuantización del espín: estas son el *Acoplamiento Espín-Orbita* (AEO) y la *Interacción Dipolo-Dipolo* (IDD), la primera intrínseca al material y la segunda dependiente de la forma de la muestra. Resultados experimentales han mostrado que estas pequeñas correcciones juegan un papel muy importante en algunos fenómenos observados en sistemas de baja dimensionalidad. En particular, la EAM es una propiedad básica para aplicaciones donde se requiere que la magnetización apunte en una dirección determinada, tal como en un imán

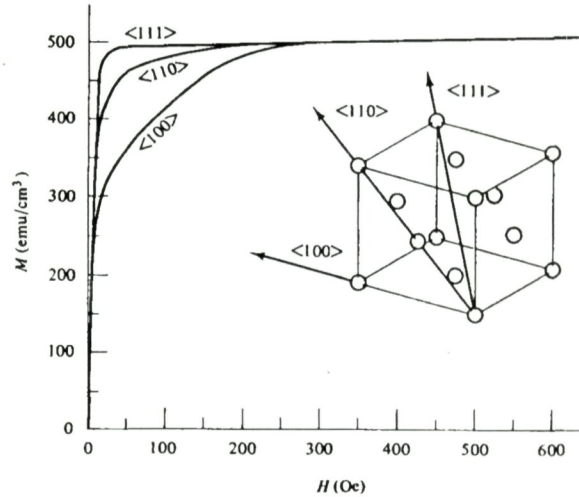


Figura 1.2 Curvas de magnetización para monocristales de Níquel [13].

permanente o bien en medios de grabación magnéticos.

Desde un punto de vista más fundamental, una de las características más fascinantes en películas ultradelgadas es que el ferromagnetismo en 2D es estabilizado exclusivamente por anisotropías magnéticas. El teorema Mermin-Wagner [22] demuestra que sistemas bidimensionales con interacciones de intercambio isotrópicas de corto alcance, pero sin interacción dipolo-dipolo y acoplamiento espín-órbita, no pueden sostener el orden ferromagnético a temperatura distinta de cero. Existen diversos mecanismos en base a los cuales se puede manifestar la anisotropía magnética [14, 13], las más importantes son la anisotropía cristalina, o de interfase, que proviene de la interacción del espín con sus alrededores, esta contribución es responsable de la magnetización perpendicular observada en algunas películas ultra delgadas y la anisotropía de forma que a su vez favorece una magnetización paralela al plano y, más aún, es el término dominante en la energía para la formación de dominios magnéticos. Por lo cual es muy tentador estudiar situaciones en las cuales estas anisotropías están cerca de compensarse mutuamente.

En un enfoque fenomenológico, la competencia entre las anisotropías cristalina y de forma determina la dirección de la magnetización. Si el equilibrio entre estas cantidades es modificando, se puede dar lugar a un cambio en la dirección de la magnetización, de una orientación perpendicular al plano hacia una dirección paralela. Sorprendentemente este delicado balance es alcanzable experimentalmente ya que depende de distintos parámetros tales como temperatura, espesor de la película y campo magnético. No obstante, con el fin

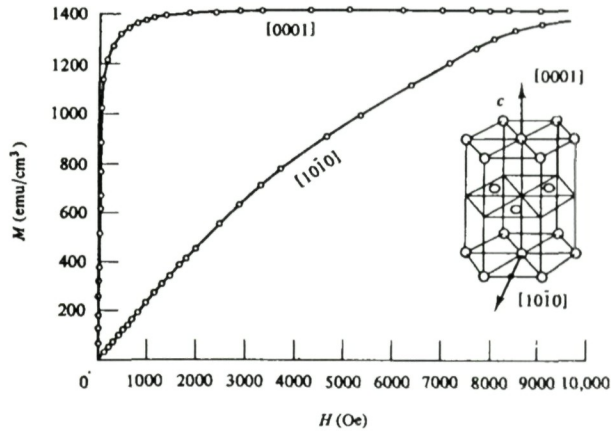


Figura 1.3 Curvas de magnetización para monocristales de Cobalto [13].

de elaborar una teoría electrónica resulta más interesante, si no necesario, aislar cada una de estas contribuciones, ya que esto permitiría elaborar y caracterizar modelos para cada una de ellas por separado. En este sentido, la IDD ha sido ampliamente estudiada y existen modelos que permiten calcularla con mucha precisión y relativa sencillez [18, 19]. Por otra parte el cálculo del AEO ha representado el origen de los problemas que enfrentan las teorías electrónicas y es, de hecho, la contribución dominante en cúmulos pequeños y sistemas cuasi bidimensionales.

1.2 El acoplamiento espín-órbita

Al construir un hamiltoniano magnético para un sistema de electrones, el espín debe aparecer explícitamente [42]. Desde el punto de vista de la mecánica cuántica, el espín es un efecto relativista por lo que formalmente el problema se debe plantear empezando por la ecuación de Dirac [43]. Sin embargo, un tratamiento relativista del electrón está fuera del contexto de este trabajo. Se ha mencionado que la anisotropía proviene del acoplamiento espín-órbita, este término aparece en el hamiltoniano de Pauli, que corresponde al de Dirac en el límite de bajas velocidades y que es básicamente la ecuación de Schrödinger con correcciones relativistas. El hamiltoniano de Pauli para un electrón en presencia de una distribución arbitraria de carga se escribe como:

$$\mathcal{H}_{\text{Pauli}} = \frac{P^2}{2m} - e\Phi - \frac{P^4}{8m^3c^2} + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla \cdot \vec{E} + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{P}) \quad (1.1)$$

La interpretación de estos términos es como sigue [42]: los primeros dos términos son respectivamente la energía cinética no relativista y la energía potencial electrostática; que forman el hamiltoniano no relativista. El tercer término es la corrección relativista de masa-velocidad. El cuarto término es la corrección de Darwin, que toma en cuenta el hecho que, dentro de la teoría relativista, el electrón es sensible al campo eléctrico dentro de una escala de longitud del orden de la longitud de onda de Compton $\lambda_C = \hbar/(mc)$. El tercer y cuarto término son comúnmente combinados con los términos no relativistas para formar lo que se conoce como hamiltoniano *escalar-relativista*. El último término en la ecuación (1.1), el cual depende del espín, es el acoplamiento espín-órbita $\mathcal{H}_{S.O.}$. Este puede ser interpretado como el acoplamiento entre el espín del electrón y el campo magnético creado por su propio movimiento orbital alrededor del núcleo. Ya que el movimiento orbital está directamente acoplado al campo eléctrico creado por la red, este término provee una contribución a la anisotropía cristalina.

Si consideramos el caso en que el electrón descrito por (1.1) es un electrón de valencia, el campo eléctrico \vec{E} que aparece en el hamiltoniano corresponde al campo del ión formado por el núcleo atómico y los electrones internos. En este caso, el término espín-órbita es grande especialmente cerca del núcleo donde, hasta una buena aproximación, el potencial posee simetría esférica [43]; entonces el campo eléctrico se puede escribir como

$$\vec{E} = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{d\Phi}{dr}, \quad (1.2)$$

de tal manera que $\mathcal{H}_{S.O.}$ se puede expresar de la siguiente manera

$$\mathcal{H}_{S.O.} = \frac{-e\hbar}{4m^2c^2r} \frac{d\Phi}{dr} \vec{\sigma} \cdot (\vec{r} \times \vec{P}) \quad (1.3)$$

$$= \frac{-e\hbar}{2m^2c^2r} \frac{d\Phi}{dr} \vec{l} \cdot \vec{s} \quad (1.4)$$

$$= \xi(r) \vec{l} \cdot \vec{s}, \quad (1.5)$$

donde

$$\xi(r) = \frac{-e\hbar}{2m^2c^2r} \frac{d\Phi}{dr}. \quad (1.6)$$

Debido a que $|\Phi(r)|$ decrece al alejarse del núcleo, toda ξ es mayor que 0.

Ya que el magnetismo de los metales de transición se debe a los electrones d , es suficiente considerar sólomente interacciones espín-órbita entre electrones d [37]. Así el AEO puede ser escrito finalmente como

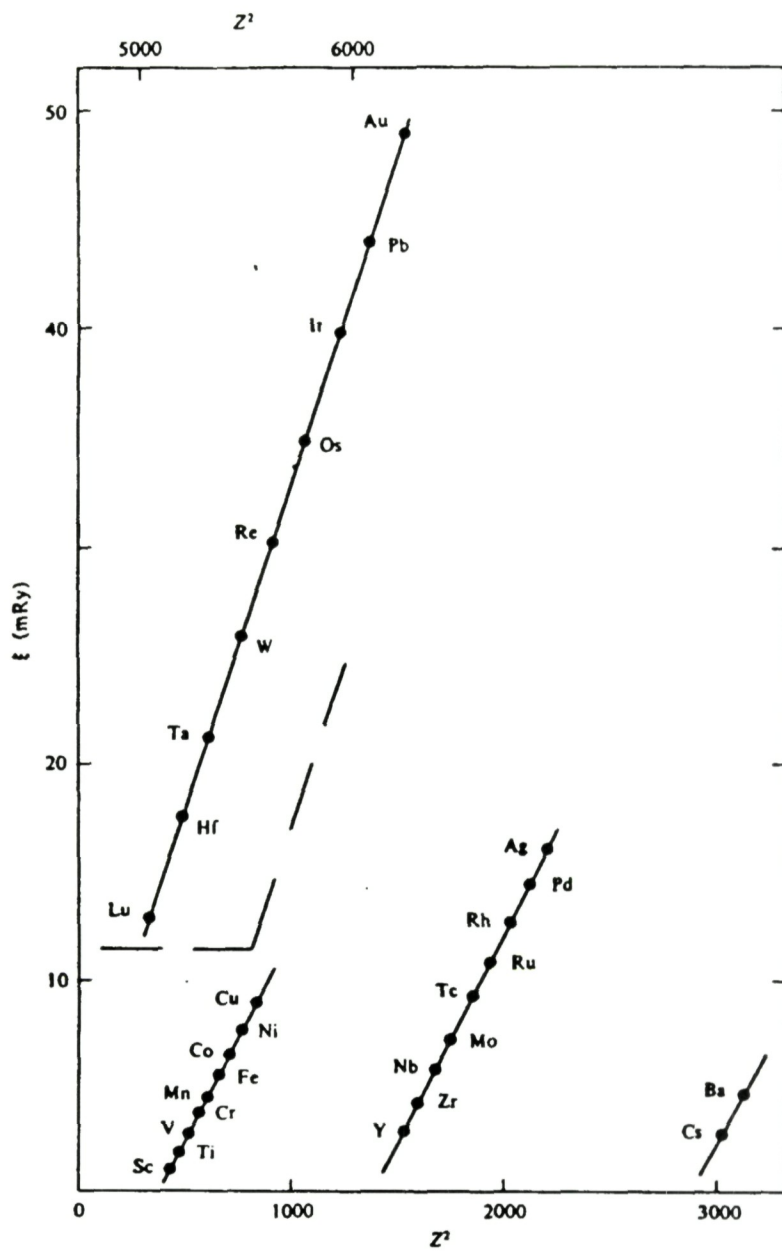


Figura 1.4: Valores calculados de la constante de espín-órbita para metales de transición; [22].

$$\mathcal{H}_{S.O.} = \xi \vec{l} \cdot \vec{s}, \quad (1.7)$$

donde la constante espín-órbita ξ , es el promedio de $\xi(r)$ sobre los orbitales d . Los valores calculados para las constantes espín-órbita de metales de transición se muestran en la figura 1.4. Tal parece que ξ aumenta considerablemente al incrementar el número atómico Z ; dentro de un período determinado de la tabla periódica, aumenta como Z^2 [43]. Para los metales $3d$, ξ es del orden de 50–100 meV.

En un átomo o ión libre, el hamiltoniano tiene simetría esférica, y el momento orbital total L es un buen número cuántico, de esta manera, el estado base tiene momento orbital distinto de cero de acuerdo con la segunda regla de Hund.

En el caso de los metales de transición $3d$, la energía del campo cristalino es típicamente del orden de 1 eV, la cual es grande en comparación a la del acoplamiento espín-órbita, de aquí, que es válido, como primera aproximación; despreciar la contribución orbital al momento magnético total. Debido al campo cristalino, los niveles de energía ya no corresponden a un número cuántico m_l definido, en su lugar éstos pueden ser etiquetados como $xy, yz, zx, x^2 - y^2$ y $3z^2 - r^2$, que corresponden a híbridos de momento orbital opuesto m_l y $-m_l$, de tal manera que el momento orbital neto de estos niveles es cero: se dice entonces que el momento orbital es *congelado* por el campo cristalino. Así pues, en la ausencia del AEO, el momento magnético de los iones $3d$ sería puramente espinorial, y el factor giromagnético $g = (2S_z + l_z)/(S_z + l_z)$ sería igual a 2. El efecto del acoplamiento espín-órbita es el de remover en parte el *congelado* del momento orbital, sin embargo, este efecto es pequeño, por lo que g permanece cerca de 2.

Tabla II: Factor giromagnético g y momento orbital $m_l = \mu_B l_z$ del Fe, Co y Ni; [22].

	Fe	Co	Ni
g	2.0910	2.1870	2.1830
m_l ($\mu_B \cdot \text{atomo}^{-1}$)	0.0918	0.1472	0.0507

El mismo efecto se observa en MT $3d$, donde el papel del campo cristalino lo juega la dispersión de los niveles en la banda, efectivamente en Fe, Co y Ni, el momento orbital esta prácticamente congelado y el factor giromagnético es aproximadamente 2 como se ve en la tabla II

Capítulo 2

Teoría Electrónica de Sistemas de Baja Dimensionalidad de Metales de Transición 3d

A continuación se presenta un modelo de estructura electrónica a $T = 0$ para describir las propiedades magnéticas en sistemas de baja dimensionalidad de MT 3d [37]. Nuestro objetivo es el de elaborar una teoría que permita calcular de manera precisa y confiable la EAM en sistemas de baja dimensionalidad, que por un lado sea lo suficientemente flexible, de manera que sea fácilmente adaptable a sistemas con estructuras muy variadas y, que por otro lado, nos permita controlar con cierta libertad la precisión numérica con esfuerzos de cómputo moderados. Esto desde luego, dentro de un marco teórico que permita incorporar la física necesaria para poder obtener información sobre los mecanismos que intervienen y determinan las características de la anisotropía magnética en estos sistemas.

2.1 El hamiltoniano de Hubbard

Un enfoque alternativo para determinar la estructura electrónica que ya ha producido numerosos resultados significativos es el método semi-empírico de amarre fuerte y modelos de muchos cuerpos relacionados con dicho método. Aquí se utiliza un conjunto base de orbitales tipo atómico para los electrones de valencia y las interacciones se reducen, mediante la aproximación de Hubbard [39], a términos caracterizados por parámetros. Consideremos el hamiltoniano *escalar relativista* más general para electrones de valencia

$$H = H_0 + H_I \tag{2.1}$$

donde H_0 representa la parte de una partícula del hamiltoniano, este término contiene las contribuciones de la energía cinética, correcciones relativistas escalares y en general cualquier

potencial externo. Mientras que H_I representa la interacción electrostática electrón electrón y es el término de muchos cuerpos del hamiltoniano. Si consideramos que al juntarse los átomos, para formar el sólido, el traslape entre los estados atómicos no es muy fuerte, entonces, debe haber alguna similitud entre los estados nuevos y los atómicos. Por lo cual es posible hacer una descripción de los estados electrónicos ocupados, en moléculas e incluso en sólidos; aproximando los estados reales $\Psi_i(\mathbf{r})$, como combinaciones lineales de orbitales atómicos $\phi(\mathbf{r})$. Entonces el hamiltoniano de amarre fuerte lo escribimos, en el formalismo de segunda cuantización como

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^+ c_{j\beta\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j,k,l \\ \sigma,\sigma'}} \langle i\alpha\sigma, j\beta\sigma' | g | k\alpha'\sigma, l\beta'\sigma' \rangle c_{i\alpha\sigma}^+ c_{j\beta\sigma'}^+ c_{l\beta'\sigma'} c_{k\alpha'\sigma}, \quad (2.2)$$

En esta ecuación $c_{i\alpha\sigma}^+$ ($c_{i\alpha\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) de un electrón con espín σ en el orbital α del átomo i ; $t_{ij}^{\alpha\beta}$ es la integral de salto desde el estado $i\alpha$ hasta el $j\beta$ y esta definida como

$$t_{ij}^{\alpha\beta} = t(R_i - R_j) = - \int d\vec{r} \phi_{i\alpha\sigma}^* h(\vec{r}) \phi_{j\beta\sigma} = (t_{ji}^{\alpha\beta})^*, \quad (2.3)$$

mientras que el término correspondiente a la interacción viene dado por

$$U_{i\alpha\sigma, j\beta\sigma'}^{k\alpha'\sigma, l\beta'\sigma'} = \langle i\alpha\sigma, j\beta\sigma' | g | k\alpha'\sigma, l\beta'\sigma' \rangle = \int \phi_{i\alpha\sigma}^*(\mathbf{x}_1) \phi_{j\beta\sigma'}^*(\mathbf{x}_2) \left(\frac{1}{r_{12}} \right) \phi_{k\alpha'\sigma}(\mathbf{x}_1) \phi_{l\beta'\sigma'}(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2. \quad (2.4)$$

donde $\phi_{i\alpha\sigma}(\mathbf{r} - R_i)$ es la función de onda atómica de un electrón en el sitio R_i en el orbital α .

En este sentido, la aproximación de amarre fuerte consiste en considerar una base finita formada por la *base mínima* necesaria tal que, para describir las propiedades electrónicas, se incluyan los efectos que son de interés. En nuestro caso, las propiedades magnéticas de MT 3d están determinadas enteramente por los electrones 3d y por lo tanto el cálculo de la estructura electrónica se puede llevar a cabo considerando sólo los orbitales d ($xy, yz, zx, x^2 - y^2$ y $3z^2 - r^2$). Al formar el sólido estos orbitales no presentan un traslape fuerte de tal manera que dan lugar a la formación de las bandas angostas características de estos sistemas.

Para poder llevar a cabo una descripción de las propiedades magnéticas de sistemas de bandas angostas se procede llevando a cabo las aproximaciones propuestas por Hubbard:

i) Para el término de una partícula se asume que $t_{ij} = t(R_i - R_j)$ decae lo suficientemente rápido con la distancia, de tal manera que los únicos elementos de matriz que se necesitan

retener son aquellos que corresponden a primeros vecinos [39]. Para sistemas de una sola componente t_{ij} se aproxima como:

$$t_{ij} = \begin{cases} t & \text{si } (i, j) \text{ son primeros vecinos} \\ 0 & \text{cualquier otro caso} \end{cases} \quad (2.5)$$

Los elementos de matriz $t_{ij}^{\alpha\beta}$ para $i \neq j$ determinan el ancho de banda, mientras que los elementos de la diagonal determinan el centro de gravedad de los estados electrónicos. Si definimos $\epsilon_{i\alpha}^0 = t_{ii}^{\alpha\alpha}$, entonces el término de un solo cuerpo puede ser escrito como

$$H_0 = \sum_{i\alpha\sigma} \epsilon_{i\alpha}^0 n_{i\alpha\sigma} + \sum_{\substack{i \neq j \\ \alpha\beta\sigma}} t_{ij}^{\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^+ c_{j\beta\sigma} \quad (2.6)$$

donde $n_{i\alpha\sigma}$ es el operador de número de partículas definido como $n_{i\alpha\sigma} = c_{i\alpha\sigma}^+ c_{i\alpha\sigma}$.

ii) Se considera que la interacción coulombiana electrón-electrón es efectivamente apantallada cuando los electrones están lo suficientemente alejados. La contribución dominante en el segundo término del hamiltoniano proviene de $i = j = k = l$, ésto es: cuando dos electrones estén en el mismo sitio y se aproxima de la siguiente manera [39]:

$$U_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'} = \begin{cases} U_{\alpha\beta\beta\alpha} & \text{si } \sigma = \sigma' \\ U_{\alpha\beta\beta\alpha} - U_{\alpha\beta\alpha\beta} & \text{si } \sigma \neq \sigma' \end{cases} \quad (2.7)$$

Si introducimos el operador de número de partículas nos valemos de las relaciones de anti-conmutación que satisfacen los operadores fermiónicos de creación-aniquilación, el término correspondiente a la interacción se puede escribir de manera compacta como

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i\alpha\beta \\ \sigma\sigma'}} U_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'} n_{i\alpha\sigma} n_{i\beta\sigma'}. \quad (2.8)$$

Este representa el hamiltoniano de Hubbard para metales de transición; y contiene toda la información sobre las correlaciones electrónicas necesarias para la aparición del momento magnético [37]. Este hamiltoniano aún retiene su carácter de muchos cuerpos, por lo cual se hará una aproximación de campo medio para obtener, finalmente, un hamiltoniano de partículas independientes. Para tal efecto, utilizaremos la siguiente identidad [42]:

$$n_i = \langle n_i \rangle + (n_i - \langle n_i \rangle), \quad (2.9)$$

donde i representa cualquier conjunto de índices. Así pues

$$n_i n_j = \langle n_i \rangle n_j + \langle n_j \rangle n_i - \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle + (n_i - \langle n_i \rangle)(n_j - \langle n_j \rangle). \quad (2.10)$$

El último término representa las fluctuaciones de la carga local $n_{i\alpha\sigma}$ con respecto a su promedio $\langle n_{i\alpha\sigma} \rangle$, y es el único término de muchos cuerpos que aparece en la identidad. Nótese que esta fluctuación local de carga, causada por los saltos $t_{ij}^{\alpha\beta}$ necesariamente está presente cuando los electrones se deslocalizan para formar el enlace metálico. Sin embargo, las correlaciones electrónicas tienden a apantallar estas fluctuaciones locales de carga y por tanto reduciendo las fluctuaciones locales de energía mediante la renormalización de la interacción de Coulomb. En la aproximación de Hartree Fock los efectos del término de fluctuaciones se desprecia y nos quedamos únicamente con los tres primeros términos. En este contexto, *no restringida* quiere decir que se considerarán explícitamente las dos direcciones de espín, permitiendo que éstas sean distintas. Por sencillez se despreciará en las ecuaciones (2.6) y (2.8) la dependencia en el orbital α de las energías de los niveles d y de las integrales de Coulomb ($\epsilon_{i\alpha}^0 \sim \epsilon_i^0; U_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'} \sim U_{\sigma\sigma'}$), y se retendrá únicamente la dependencia de U en el espín debida al intercambio. Sustituyendo en H_I :

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i\alpha\beta \\ \sigma\sigma'}} U_{\sigma\sigma'} (\langle n_{i\beta\sigma'} \rangle n_{i\alpha\sigma} + \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle n_{i\beta\sigma'}) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i\alpha\beta \\ \sigma\sigma'}} U_{\sigma\sigma'} \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle \langle n_{i\beta\sigma'} \rangle. \quad (2.11)$$

Si suponemos que $U_{\uparrow\downarrow} = U_{\downarrow\uparrow}$ y $U_{\uparrow\uparrow} = U_{\downarrow\downarrow}$ y separamos las sumas en el espín obtenemos

$$H_I = \sum_{\substack{i,\alpha\neq\beta \\ \sigma}} U_{\uparrow\uparrow} (n_{i\alpha\sigma} \langle n_{i\beta\sigma} \rangle - \frac{1}{2} \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle \langle n_{i\beta\sigma} \rangle) + \sum_{\substack{i,\alpha\beta \\ \sigma}} U_{\uparrow\downarrow} (n_{i\alpha\sigma} \langle n_{i\beta\sigma'} \rangle - \langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle \langle n_{i\beta\downarrow} \rangle), \quad (2.12)$$

que podemos reescribir de manera más compacta como:

$$H_I = \sum_{i,\alpha\sigma} \left(U_{\uparrow\downarrow} \langle n_{i\sigma'} \rangle + \frac{4}{5} U_{\uparrow\uparrow} \langle n_{i\sigma} \rangle \right) n_{i\sigma} - E_{dc}(i), \quad (2.13)$$

donde

$$E_{dc}(i) = U_{\uparrow\downarrow} \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle + \frac{U_{\uparrow\uparrow}}{2} \frac{4}{5} \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\uparrow} \rangle + \frac{U_{\uparrow\uparrow}}{2} \frac{4}{5} \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle. \quad (2.14)$$

El momento magnético por ión es:

$$\mu_i = \sum_{\alpha} (\langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle - \langle n_{i\alpha\downarrow} \rangle), \quad (2.15)$$

el número promedio de electrones por ión es ν_i

$$\nu_i = \sum_{\alpha} (\langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle + \langle n_{i\alpha\downarrow} \rangle), \quad (2.16)$$

y si tomamos el caso de metales de transición: $\alpha = 1, \dots, 5$, entonces

$$H_I = \sum_{i\alpha\sigma} \left[U_d \nu_i - \frac{\sigma J \mu_i}{2} \right] n_{i\sigma} - E_{dc}, \quad (2.17)$$

donde

$$U_d = \frac{U_{\uparrow\downarrow} + \frac{4}{5} U_{\uparrow\uparrow}}{2} \quad (2.18)$$

$$J = \frac{U_{\uparrow\downarrow} - \frac{4}{5} U_{\uparrow\uparrow}}{2}. \quad (2.19)$$

Si definimos $\epsilon_{i\alpha\sigma} = \epsilon_i^0 + U_d \nu_i - \sigma(J/2)\mu_i$, llamada energía de corrimiento, llegamos al siguiente hamiltoniano de campo medio:

$$H = \sum_{i\alpha\sigma} \epsilon_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\sigma} + \sum_{\substack{i \neq j \\ \alpha\beta\sigma}} t_{ij}^{\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^+ c_{j\beta\sigma} - E_{dc}, \quad (2.20)$$

que describe la dinámica de cada electrón como si cada uno fuese una partícula independiente moviéndose en el campo efectivo $\Delta\epsilon_{i\alpha\sigma} = U_d \nu_i - \sigma(J/2)\mu_i$ generado por los otros electrones.

Físicamente, el modelo nos dice que la distribución de los estados electrónicos está determinada por las contribuciones de (i) las integrales de salto que determinan el carácter de bandas de los estados electrónicos y (ii) la energía de correlación y de intercambio intratómicas U y J respectivamente, a las energías electrónicas originales dadas por ϵ_i^0 (que representa el nivel de referencia de la energía). En otras palabras, las propiedades electrónicas en cada sitio estarán determinadas por los corrimientos sobre ϵ_i^0 inducidos por la fluctuación de carga $t_{ij}^{\alpha\beta}$, las propiedades magnéticas $\sigma J/2\mu(i)$ y los efectos de la transferencia de carga en cada sitio $U_d \nu(i)$. Los niveles de energía *corridos*

$$\epsilon_{i\alpha\sigma} = \epsilon_{i\alpha}^0 + \Delta\epsilon_{i\alpha\sigma}, \quad (2.21)$$

el número de electrones d , $\nu_\alpha(i)$ y los momentos magnéticos locales, $\mu_\alpha(i)$ del orbital α en el sitio i , definidos según (2.16) y (2.15), se determinan autoconsistentemente requiriendo que

$$\langle n_{i\alpha\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \rho_{i\alpha\sigma}(\epsilon) d\epsilon. \quad (2.22)$$

Aquí, $\rho_{i\alpha\sigma}(\epsilon)$ se refiere a la densidad local de estados electrónicos (DLE) que está dada por

$$\rho_{i\alpha\sigma}(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{i\alpha\sigma, i\alpha\sigma}(\epsilon)\}, \quad (2.23)$$

donde $G_{i\alpha\sigma, i\alpha\sigma}$ se refiere al elemento diagonal del operador de la función de Green $G(\epsilon) = [H - \epsilon]^{-1}$ el cual puede ser calculado utilizando el método de recursión de Haydock [40]. Este tema se revisará en el apéndice A.

La energía de Fermi ϵ_F se determina de la condición de neutralidad global de carga: $\sum_{i\sigma} \nu_{i\sigma} = Nn_d$, donde n_d es el número de electrones d por átomo.

Para las integrales de salto $t_{ij}^{\alpha\beta}$ entre los orbitales $i\alpha$ y $j\beta$, dadas a partir de las integrales de dos centros de Slater-Koster $t_{ll'\lambda}(l, l' = s, p, d; \lambda = \sigma, \pi, \delta)$, asumimos sus valores canónicos que varían como la inversa de la quinta potencia de la distancia interatómica d_0 : $dd(\sigma, \pi, \delta) = (-6, 4, -1)(W_d/2.5)(S/d_0)^5$ [41]. Aquí, W_d es el ancho de banda d para el bulto y S es el radio de Wigner-Seitz. Nótese que únicamente se está contemplando la posibilidad de transferencia de carga polarizada en espín entre distintos átomos y orbitales de simetría distinta. Esto es importante en sistemas de baja dimensionalidad puesto que los cambios en el entorno local inducen cambios en $\rho_{i\alpha\sigma}(\epsilon)$ y $\langle n_{i\alpha\sigma} \rangle$ que están acoplados. Para los valores de U y J , se asume que éstas son independientes del tamaño del sistema [37] y que, por lo tanto retienen su carácter atómico. En la práctica los valores de estos parámetros se obtienen a partir de datos de espectroscopía atómica.

2.2 Cálculo de la energía de anisotropía magnética

El cálculo de las propiedades magnéticas expuesto hasta aquí, supone implícitamente que los momentos magnéticos locales son colineales y se ha tomado la dirección del eje de cuantización del espín con la dirección de $\mu(i)$. Como consecuencia de que el hamiltoniano no depende explícitamente del eje de cuantización del espín, las propiedades del sistema (por ejemplo, la energía electrónica o los momentos magnéticos) son independientes de la dirección de la magnetización.

Para determinar la dirección preferencial que adopta la magnetización respecto a los ejes definidos por la simetría del sistema, así como otras propiedades relativas a la anisotropía magnética (por ejemplo, el momento angular orbital $\langle \vec{L} \rangle$), es necesario incluir en el hamiltoniano las principales correcciones relativistas que rompen la simetría rotacional del espín. Estas son las interacciones dipolares de espín y el acoplamiento espín-órbita. Las estimaciones cuantitativas muestran que el AEO es la contribución dominante en monocapas y cúmulos pequeños.

Para incorporar el AEO, éste se aproxima por un término de una partícula e intra-atómico dado como:

$$H_{EO} = -\xi \sum_{i,\alpha\sigma,\beta\sigma'} (\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i)_{\alpha\sigma,\beta\sigma'} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma}. \quad (2.24)$$

Aquí $(\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i)_{\alpha\sigma,\beta\sigma'}$ se refiere a los elementos de matriz intra-atómicos de $\vec{L} \cdot \vec{S}$ entre orbitales d , que acoplan estados de diferente espín y que dependen de la orientación relativa de la magnetización $\langle \vec{S} \rangle$ y de la estructura del sistema.

Como en el caso isotrópico ($\xi = 0$) la distribución de carga $\nu_\alpha(i)$ y los momentos magnéticos totales $\mu_\alpha(i)$ se determinan autoconsistentemente resolviendo las ecuaciones (2.6) y (2.8). Sin embargo, cuando $\xi \neq 0$ es necesario considerar el término H_{SO} en el cálculo de las densidades locales $\rho_{i\alpha\sigma}(\epsilon)$. La energía electrónica E_δ que ahora depende de la dirección de magnetización δ (con $\delta = x, y, z$) esta dada por

$$E_\delta = \sum_{i\alpha\sigma} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} E \rho_{i\alpha\sigma}(E) dE - E_{dc}, \quad (2.25)$$

donde $E_{dc} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i\alpha\beta \\ \sigma\sigma'}} U_{\sigma\sigma'}^{\sigma\sigma'} \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle \langle n_{i\beta\sigma'} \rangle$ es la corrección debida al doble conteo de las interacciones Coulombianas.

La energía de anisotropía magnética ΔE está definida como la variación de E_δ asociada al cambio en la dirección de la magnetización $\langle \vec{S} \rangle$. Por ejemplo, $\Delta E = E_x - E_z$ mide la estabilidad relativa de la magnetización a lo largo de los ejes x y z .

Hay que señalar que al calcular ΔE de esta manera — realizando el cálculo autoconsistente para cada dirección de la magnetización δ — se incluyen las contribuciones debidas a la redistribución de carga y a la variación de los momentos magnéticos locales. Estas contribuciones, que son ignoradas por los cálculos perturbativos, pueden ser particularmente importantes en sistemas de baja dimensionalidad, donde el traslape de los niveles de energía con el nivel de Fermi inducen cambios importantes en la estructura electrónica y en los momentos magnéticos locales. Finalmente mencionamos que la componente del momento angular orbital $L_{i\delta}$ del átomo i a lo largo de la dirección de magnetización $\langle \vec{S} \rangle$, se obtiene a partir de

$$L_{i\delta} = \sum_{m=-2}^2 m \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \rho_{im}(\epsilon) d\epsilon, \quad (2.26)$$

donde $\rho_{im}(\epsilon) = \rho_{im\uparrow}(\epsilon) + \rho_{im\downarrow}(\epsilon)$ se refiere a la densidad local de estados en la base de los armónicos esféricos con $l = 2$, donde el eje de cuantización es paralelo a $\langle \vec{S} \rangle$.

Capítulo 3

Resultados

El modelo que se ha descrito en el capítulo anterior, en principio debe de responder a los objetivos que hemos planteado en la introducción: por un lado contar con un método basado en las técnicas del espacio real, de tal manera que sea fácilmente aplicable a sistemas de baja dimensionalidad; por otro lado, debe mostrar ser un medio preciso y confiable para determinar la EAM en estos sistemas.

Trabajos anteriores basados en este mismo enfoque [15, 38] han mostrado que el modelo describe de manera adecuada las propiedades y tendencias de la EAM en monocapas de MT siempre que el sistema esté caracterizado por una interacción de intercambio fuerte.

Pastor *et al.* [16] recientemente han utilizado este mismo método para estudiar la anisotropía magnética en cúmulos pequeños de MT en términos de las propiedades estructurales de estos sistemas, el resultado más interesante que obtuvieron fué la fuerte dependencia de la EAM en el entorno local, en particular, observaron que cuando el sistema, por ejemplo se contrae y aumenta el ancho de banda, pierde su estado de saturación magnética, las propiedades magnéticas anisotrópicas muestran un comportamiento muy distinto al predicho por la teoría de perturbaciones. De aquí se concluye que la determinación autoconsistente de las propiedades magnéticas, debe jugar un papel crucial en el cálculo confiable de la EAM en sistemas no periódicos.

En el caso de películas delgadas de MT, los cambios en el entorno local podrían dar lugar a resultados análogos a los observados en cúmulos. En particular, bajo ciertas circunstancias, al depositar el MT sobre un sustrato se puede obtener un sistema magnético no saturado, en este caso se deben observar diferencias notables en las propiedades de la EAM y por lo tanto es de esperar que la importancia de realizar cálculos autoconsistentes sea evidente.

Con el fin de poder estudiar y cuantificar las tendencias de la EAM así como su dependencia en el entorno local, hemos llevado a cabo un estudio sistemático de la anisotropía magnéticas en monocapas de MT considerando sistemas en los regímenes de intercambio

fuerte (RIF), medio (RIM) y débil (RID). Considerando que, particularmente, en el RID la determinación autoconsistente de las propiedades magnéticas juega un papel importante, procedimos, como primer punto, a estudiar las propiedades de convergencia de la fracción continua (FC). Enseguida se ha introducido una aproximación apropiada para describir sistemas con corrimientos de intercambios débiles. En este punto se realizan cálculos muy extensos de la EAM y otras propiedades magnéticas en función del entorno local, el llenado de la banda $3d$ y de la magnitud del AEO (ξ). A partir de los resultados obtenidos se establecerá una comparación con los resultados obtenidos por la teoría de perturbaciones. Finalmente se realizarán cálculos autoconsistentes, con lo cual se busca encontrar las diferencias, si las hay, con los resultados obtenidos previamente y medir que tan considerables resultan estas diferencias.

3.1 Convergencia de la fracción continua

Los cálculos realizados en este trabajo siguen el trabajo publicado por Pick *et al.* [38] en donde calcularon la EAM utilizando el mismo modelo que presentamos aquí. Este trabajo, sin embargo, presenta varias inconsistencias pues, según los autores, las curvas de EAM deben exhibir un comportamiento canónico simple. Sin embargo, las curvas que reportan muestran un comportamiento oscilatorio muy irregular que, de acuerdo con otros investigadores [26, 32], tienen origen en el tratamiento numérico.

En un trabajo posterior [15] se presentó un estudio de las propiedades de la convergencia del cálculo. En este trabajo se concluyó que estas oscilaciones eran, efectivamente, resultado del tratamiento numérico y se encontró una solución sencilla mediante la cual es posible obtener resultados convergentes y confiables. El origen del problema resultó estar relacionado con la elección de los vectores base que se utilizan para calcular las densidades locales de estados.

Cuando se utiliza el método de recursión para determinar la estructura electrónica en MT $3d$, la densidad local de estados (DLE) ρ en un átomo determinado se expresa como la suma de diez DLE parciales ρ_i asociadas con los diez espín-orbitales d , esto es, como la $\text{Tr}\pi^{-1}\text{Im}G^{ii}(E + i\epsilon)$, donde G es la función de Green. Los diez espín-orbitales ϕ_i forman una base local, dentro de la cual cada miembro sirve como vector inicial en el cálculo recursivo de G^{ii} .

Por lo general, resulta más conveniente y natural utilizar una base que sea consistente con la simetría del problema. Si consideramos el caso de una monocapa tenemos que, cuando $\xi = 0$, (a) los orbitales (xz, yz) no se mezclan con el resto de los orbitales d debido a la simetría de reflexión $z \rightarrow -z$ (z es la dirección normal al plano), y (b) de la misma

manera, tampoco se llegan a mezclar las bandas minoritaria y mayoritaria. En este caso se puede construir una base a partir de orbitales de espín cuya parte espacial corresponden a los vectores propios del operador de momento angular (armónicos esféricos) con el eje de cuantización a lo largo del eje z y $l_z = 2, 1, \dots, -2$. La parte espinorial corresponde a espines paralelos y antiparalelos a la dirección de la magnetización, que, en su momento, se escoge en las direcciones de los ejes z y x . Sin embargo, la elección del eje de cuantización a lo largo de z , orientado normal a la superficie de la monocapa, no respeta la simetría $z \rightarrow -z$ cuando el momento magnético apunta en la dirección del eje x . Pick *et al.* [38] consideraron que esta base era un punto de partida muy pobre para el cálculo de las DLEs, por lo que decidieron realizar el cálculo orientando el eje de cuantización a lo largo de cada una de las direcciones del momento magnético. Por sencillez, llamemos a estas bases *bases no mixtas* z y x , NMz y NMx, respectivamente.

Para entender el origen de las oscilaciones irregulares es necesario darse cuenta que las bases NM resultan ser un mal punto de partida para el cálculo una vez que se introduce el AEO ($\xi \neq 0$). Consideremos, por ejemplo, un espín orbital de la banda minoritaria. Sin el AEO, para el RIF, ρ_i es prácticamente cero en gran parte de la región correspondiente a la banda mayoritaria. Sin embargo, al introducir el AEO, ρ_i adquiere una pequeña componente, distinta de cero, en esta región debido a la hibridación entre estados con espines antiparalelos que introduce el AEO. De manera similar el desdoblamiento de la degeneración inducido al considerar $\xi \neq 0$ ocasiona que la DLE parcial correspondiente a la banda angosta (xz, yz) se expanda y brinque a la región de la banda más ancha e_g . Debido a que ξ es muy pequeña, la nueva componente de ρ_i también debe ser muy pequeña. De tal manera que las oscilaciones sólo reflejan el hecho de que la parte imaginaria de la función de Green contiene polos que pueden estar muy cerca del eje real y por lo tanto es necesario considerar números muy grandes de niveles en la fracción para poder obtener un conjunto de polos distribuidos homogéneamente.

La solución que se propuso posteriormente consiste en utilizar una nueva base que no respete ninguna simetría. Al utilizar una base mixta (M) en la cual cada vector de la base se construye como combinación lineal de todos los espín orbitales, en este caso orbitales $3d$, se obtienen DLEs parciales que son distintas de cero en todo el espectro de energías aún cuando $\xi = 0$, y con esto el comportamiento oscilatorio irregular no ocurre.

Es importante señalar dos propiedades de la base mixta. Primero, debido a que los espines están mezclados ya no es posible calcular las densidades de carga polarizadas en espín y por lo tanto, las DLEs parciales obtenidas con esta base no son apropiadas para calcular el momento magnético. Sin embargo, como señalan los autores [15], este no es un problema serio, puesto que para corrimientos de intercambio fuertes en películas delgadas,

el momento magnético está prácticamente saturado. La segunda propiedad que se desea mencionar es que, como ahora los armónicos esféricos están mezclados, la base M no permite obtener el valor inducido del momento magnético orbital.

3.2 Energía de anisotropía magnética en monocapas bcc y fcc

A partir de lo que se acaba de discutir, es claro que la convergencia de la fracción continua juega un papel muy importante en la determinación precisa y confiable de la EAM. Pero como se ha mencionado existe mucho interés por estudiar la EAM en sistemas caracterizados por corrimientos de intercambio débiles donde el cálculo autoconsistente probablemente juegue un papel importante. En este sentido se debe decir que el uso de una base mixta no permite llevar a cabo cálculos autoconsistentes. Por esta razón el primer punto que se ha decidido tratar es el de estudiar la convergencia de la fracción continua utilizando una base que permita calcular las densidades de carga polarizadas en espín. Para esto, se utilizará una base no mixta.

Para este trabajo se ha escogido trabajar con la monocapa bcc (001) ajustada al sistema Fe/Cu (001) pues es un sistema para el cual se conocen bien sus parámetros, además de que existen muchos trabajos experimentales [5, 6, 7] y teóricos [33, 46, 28] reportados, con los cuales es posible comparar los resultados.

Por simplicidad y con el fin de aislar el efecto del llenado de la banda d se ha considerado como primera aproximación una separación de intercambio $\Delta\epsilon$ independiente del número de electrones d y de la dirección de la magnetización, esto es, suponemos $J\mu = \lambda$ como constante. Para el caso de la monocapa Fe/Cu (001) el momento magnético, prácticamente saturado, es ~ 2.9 mientras que el valor de J es aproximadamente 1 eV, con lo cual obtenemos que $\lambda = 2.9$ eV. Para el valor del parámetro del AEO ξ tomamos el valor correspondiente al Fe: 0.05 meV. Para cálculos posteriores, se han considerado monocapas de Fe/Cu y Co/Cu, los parámetros se encuentran tabulados en la tabla III.1, donde los valores del parámetro de intercambio J , se han obtenido a partir de ajustar al momento magnético del bulto considerando, en cada caso, números de ocupación distintos.

Como se señaló, la densidad de estados ρ en un átomo determinado ésta dada por $\text{Tr}\pi^{-1}\text{Im}G^{ii}(E + i\epsilon)$. Debido a que la traza es invariante, cualquier otra base obtenida mediante una transformación unitaria debería dar la misma DLE, pero debido a que G^{ii} únicamente se determina en forma aproximada, la afirmación anterior también es válida sólo de manera aproximada. Sin embargo, es de esperar que si se calcula G^{ii} de manera exacta, se debe obtener la misma DLE para cualquier conjunto de bases relacionadas entre sí por una

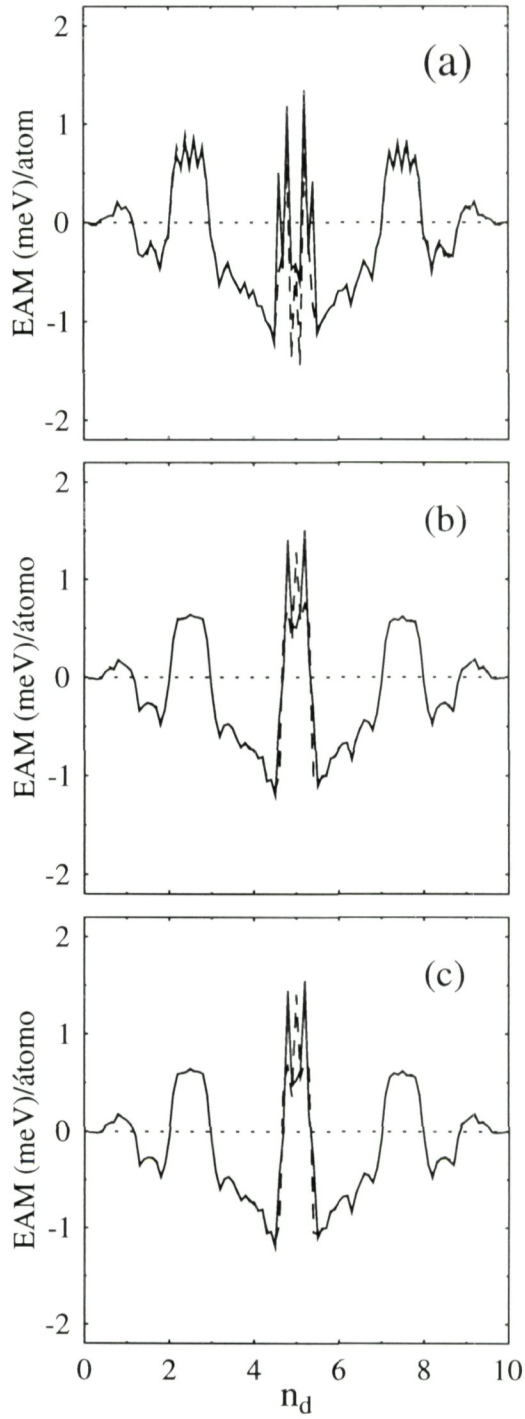


Figura 3.1: EAM para intercambios fuertes, contra llenado de la banda d para una monocapa $\text{bcc}(001)$ utilizando 25 (a), 75 (b) y 150 (c) niveles en la FC, la línea continua (punteada) corresponde a la EAM calculada utilizando la base NMz (NMx). Valores negativos favorecen una orientación perpendicular de la magnetización.

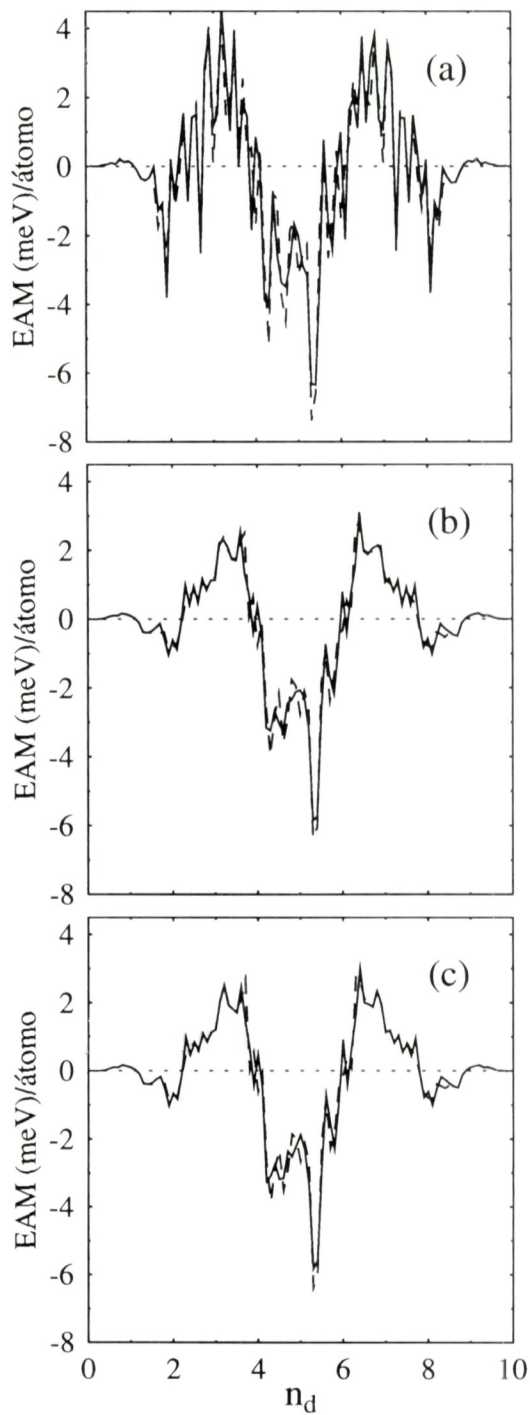


Figura 3.2: EAM para intercambios débiles, contra llenado de la banda d para una monocapa $bcc(001)$ utilizando 25 (a), 75 (b) y 150 (c) niveles en la FC, la línea continua (punteada) corresponde a la EAM calculada utilizando la base NMz (NMx). Valores negativos favorecen una orientación perpendicular de la magnetización.

transformación unitaria. Por esta razón y con el fin de verificar explícitamente la precisión de los cálculos, se han realizado dos cálculos independientes de la EAM que corresponden, respectivamente, a la EAM calculada en cada una de la bases NMz y NMx. Así mismo, y con el fin de estudiar las tendencias de la EAM a lo largo de la serie 3d, los cálculos se han realizado variando el llenado de la banda d ($0 < n_d < 10$).

Tabla III.1 Valores de los parámetros utilizados para cada material y para cada número de ocupación n_d . J se refiere a la interacción de intercambio, W_{dv} al ancho de banda del volumen.

	n_d	J (eV)	W_{dv} (eV)
Fe	6.8	0.682	6.0
Fe	7.0	0.672	6.0
Fe'	7.0	0.527	6.0
Fe	7.2	0.676	6.0
Co	7.8	0.733	5.5
Co	8.0	0.706	5.5
Co	8.2	0.694	5.5

En las figuras 3.1 (a), (b) y (c) se muestran los resultados obtenidos para la monocapa bcc(001) variando el número de niveles en la fracción continua. Veamos primero algunas de las características generales que muestran los resultados. Lo primero que notamos es que conforme aumentamos el número de niveles en la fracción continua, el comportamiento irregular de la EAM tiende a desaparecer y más aún, observamos que las curvas tienden a suavizarse, lo cual está en acuerdo con lo que se discutió anteriormente. Si comparamos cada una de las figuras también se observa que las diferencias entre las EAMs calculadas utilizando las bases NMz y NMx se van haciendo cada vez más indistinguibles al incrementar el número de niveles, dentro del modelo la precisión estimada es de 10^{-5} eV, de manera que para un número suficientemente grande de niveles obtenemos resultados convergentes. Una característica interesante en todas las curvas es que todas muestran un comportamiento simétrico respecto a $n_d = 5$, sobre esto podemos decir que dicho comportamiento surge a raíz del hamiltoniano modelo que se ha utilizado y dicha simetría es un caso particular propio de la monocapa bcc (001), que tiene la propiedad de ser *bipartita* se puede demostrar que para una red de este tipo el hamiltoniano es invariante cambiar electrones por agujeros. En la figura 3.1(c) se puede ver que, al igual que otros autores [25, 28], para el caso del Fe, $n_d \sim 7$, se esta muy cerca del punto donde la EAM cambia de signo: $\Delta E(n_d = 6.9) = 0.374$ meV, $\Delta E(n_d = 7.0) = 0.076$ meV con dirección fácil perpendicular y $\Delta E(n_d = 7.1) = 0.369$ meV con dirección preferencial en el plano, mientras que para el momento magnético se obtuvo $2.9 < \mu < 3.0\mu_B$. Este resultado coincide bastante bien con otros resultados obtenidos de

primeros principios que, para este sistema, obtuvieron una EAM de ~ 0.6 meV [46] y 0.570 meV [33] con una dirección fácil perpendicular al plano.

Experimentalmente se ha observado que para películas de Fe con un grosor de $\sim 6A$, que corresponde a grosores menores de 2.8 MC, el momento magnético es, efectivamente, perpendicular a la superficie [5, 6]. Esto sugiere que el papel que juega el sustrato es importante, pues cualquier cambio pequeño en el entorno puede resultar en la inversión del momento magnético.

En las figuras 3.2 (a), (b) y (c) se muestran resultados análogos a los anteriores. En este caso, se ha considerado para el parámetro J el valor del Fe' ($n_d = 7$) que, sabemos, corresponde a un intercambio débil. Como se puede ver en las gráficas, al igual que en el caso de J grande, al aumentar el número de niveles, las diferencias entre las EAMs calculadas utilizando las bases NMz y NMx tienden a desaparecer, sin embargo, aún cuando se considera un número grande de niveles en la FC (150) fig. 3.2 (c) las curvas no parecen estar cerca de ser suaves. Otro punto interesante es que, como se puede observar, ahora las curvas han perdido su carácter simétrico, mientras que, para este valor de J , la EAM favorece una dirección fácil en el plano. Estos resultados reflejan, por un lado, la estrecha relación que hay entre J y la EAM, mientras que por otro lado hacen patente el hecho de que para intercambios débiles la EAM presenta características más sutiles. Cabe aclarar que en este momento no es factible considerar con más detalle estos resultados ya que éstos se han obtenido a partir de una aproximación que, sabemos, es muy pobre para describir sistemas que se encuentran en el RID por lo que este punto se debe reconsiderar en el contexto de una aproximación que sea más apropiada.

Para concluir el estudio sobre la convergencia del modelo, también nos hemos preguntado por los posibles cambios en el comportamiento de la convergencia como función de la estructura, pues como se señaló en el capítulo anterior, la geometría de la estructura entra directamente en el cálculo de los coeficientes de recursión.

Al respecto, se realizaron cálculos de la EAM para una monocapa fcc(111). Los resultados correspondientes a 25, 75 y 150 niveles se muestran en las figuras 3.3 (a), (b) y (c), respectivamente. De nuevo podemos notar que los resultados obtenidos para la anisotropía en las dos orientaciones del eje z coinciden bastante bien siempre y cuando se consideren un número lo suficientemente grande de niveles en la FC. Como se esperaba, el comportamiento simétrico se ha perdido. Pero, por otro lado, como se puede ver en la figuras, los resultados para 75 y 150 niveles coinciden mejor que para el caso de la estructura bcc. El hecho de que exista esta diferencia no es una sorpresa, pues es bien sabido que resulta más complicado realizar cálculos para una estructura bcc debido el empaquetamiento es menor en esta última [41]. Estos resultados claramente indican que el comportamiento de la convergencia se ve

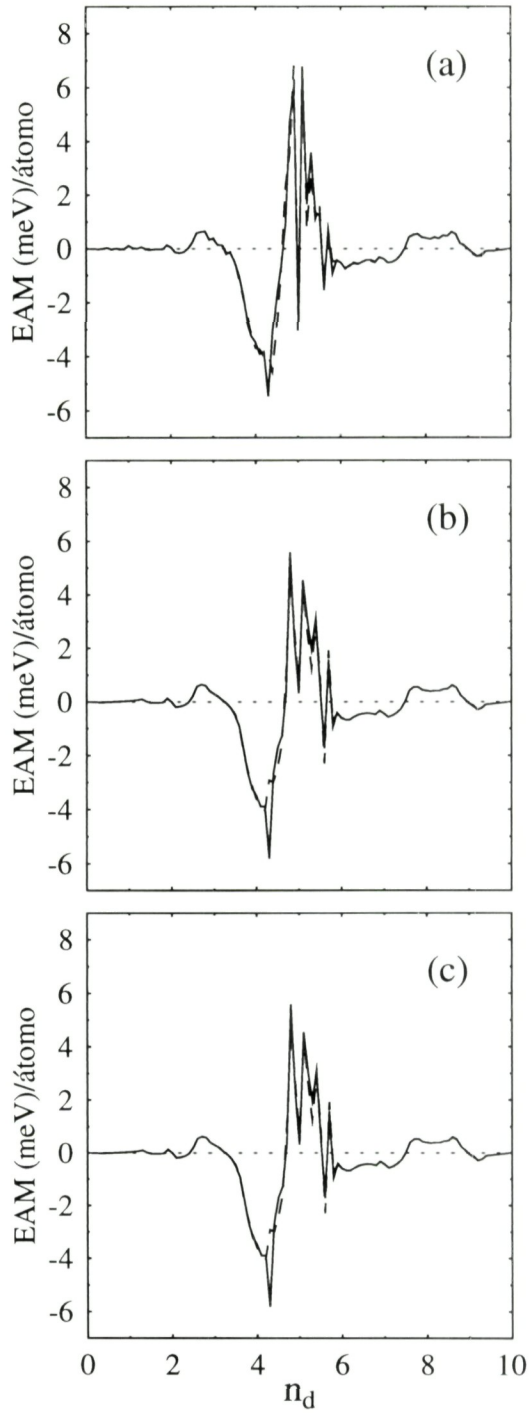


Figura 3.3: EAM contra llenado de la banda d para una monocapa fcc(111) utilizando 25 (a), 75 (b) y 150 (c) niveles en la FC, la línea continua (punteada) corresponde a la EAM calculada utilizando la base NMz (NMx). Valores negativos favorecen una orientación perpendicular de la magnetización.

afectado por el tipo de estructura.

Por otro lado sabemos que el número de niveles considerados en la fracción continua está directamente relacionada con el número de átomos que se utilizan para construir el sistema semi-infinito que hace las veces de monocapa. En la tabla III.2 se muestran la número de átomos necesarios para realizar los cálculos en cada una de las estructuras consideradas, en función del número de niveles de la fracción continua.

Tabla III.2 Número de átomos necesarios en función del número de niveles considerados en la fracción continua para cada estructura empleada.

Niveles	bcc(100)	fcc(111)
25	1301	1951
50	5101	7651
75	11401	17101
100	20201	30301
125	31501	47251
150	45301	67951

De estos datos se puede inferir que la convergencia se puede expresar en términos del número de átomos. A partir de los resultados para ambas estructuras, podemos decir que para obtener resultados convergentes, en el caso de monocapas, se necesitan considerar del orden de 20000 átomos, independientemente del tipo de estructura.

3.3 Más allá de la aproximación de corrimiento de intercambio constante

Hasta este punto hemos centrado nuestra atención principalmente en la caracterización del modelo, para lo cual se ha utilizado una aproximación sencilla que nos permite realizar los cálculos rápidamente. Sin embargo, nuestro objetivo es el de poder calcular la EAM en sistemas más realistas y más complejos. Los resultados anteriores sugieren que el papel que juega el sustrato es muy importante mientras que de igual manera, han puesto de manifiesto que las propiedades magnéticas presentan cambios drásticos cuando el sistema no tiene momento magnético saturado. Por esta razón nos interesa introducir una aproximación que permita describir adecuadamente al sistema, aún cuando el momento magnético no esté saturado.

Una aproximación más realista se puede obtener si consideramos que el término del corrimiento depende explícitamente del momento magnético, esto es: $\Delta\epsilon \propto \mu \sim (10 - \nu_d)\mu_B$ para $\nu_d > 5$, esto significa que el momento magnético está saturado, pero con el valor correcto para cada valor de ν_d .

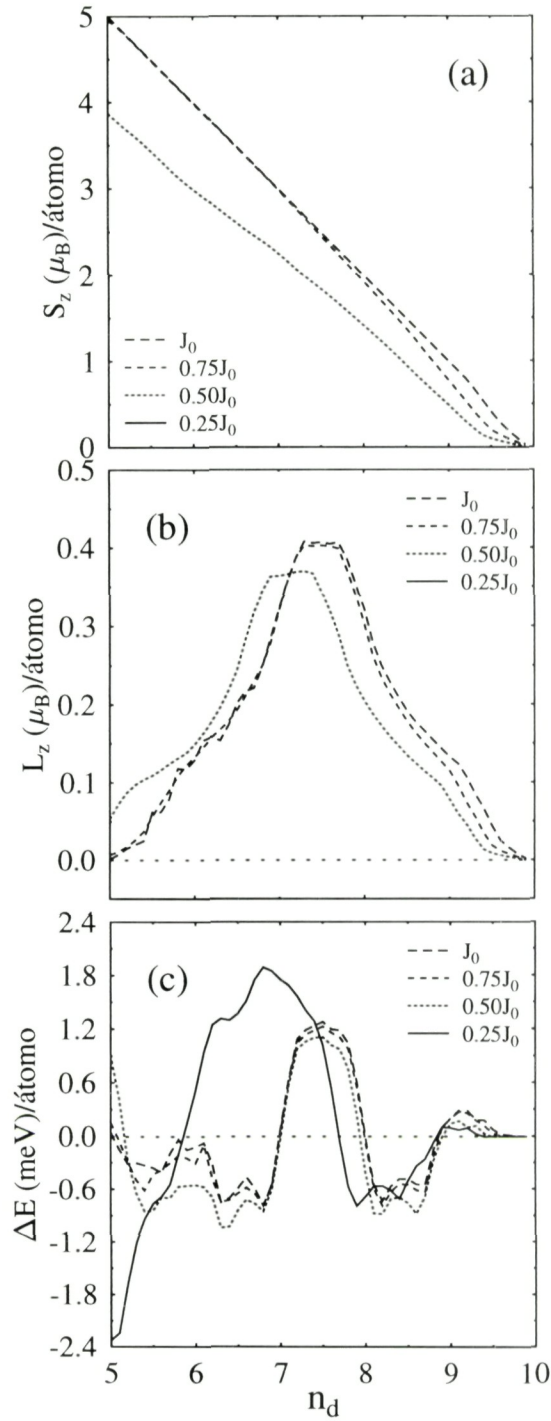


Figura 3.4: Momento magnético (a), Proyección del momento angular (b) y EAM (c) contra llenado de la banda d variando el parámetro de intercambio. Las curvas corresponden a una monocapa bcc(001) utilizando 100 niveles en la FC.

En particular, nos interesa estudiar y cuantificar como es la dependencia de la EAM (ΔE), $\langle L_\delta \rangle$ y $\langle S_z \rangle$ en el entorno local, el llenado de la banda d y el parámetro de AEO. Con este fin, se ha llevado a cabo un estudio sistemático de las propiedades magnéticas para la monocapa bcc(001) ajustada al sistema Fe/Au en función del llenado de la banda d [15].

Para estudiar los efectos del entorno se ha procedido a variar el parámetro de intercambio J que aparece en el hamiltoniano. Partiendo de un valor original del parámetro, sea éste J_0 , que corresponde al caso del sistema Fe/Au (Fe, $n_d = 7.0$, en la tabla III.1) se ha ido reduciendo hasta valores de J que caracterizan a un sistema con un intercambio medio ($J = J_0/2$) y débil ($J = J_0/4$). En este sentido se debe aclarar que los valores obtenidos para $J < J_0$ no corresponden a ningún sistema real, sin embargo, nuestro interés en este momento es estudiar las tendencias de las propiedades magnéticas en los regímenes de intercambio fuerte (RIF), medio (RIM) y débil (RID).

En la figura 3.4 se muestran los resultados obtenidos para (a) $\langle S_z \rangle$, (b) $\langle L_\delta \rangle$ y (c) ΔE como función del parámetro de intercambio. Como se puede notar, mientras $J > J_0/4$, todas estas cantidades muestran un comportamiento muy estable y prácticamente constante cuando variamos J .

Este resultado viene a apoyar la validez de la aproximación de corrimiento constante para sistemas en el RIF, pues mientras el momento magnético esté saturado, el sistema retiene gran parte de sus características atómicas y por lo tanto, aproximadamente, las reglas de Hund son válidas, ésto claramente se manifiesta en las curvas (fig 3.4) de los momentos magnéticos de (a) espín y, (b) orbital. Mientras que el comportamiento constante de la EAM se obtiene como consecuencia de que los cambios en la energía electrónica dependen en la forma explícita de H_{SO} , esto es: $\langle S_z \rangle$ y $\langle L_\delta \rangle$.

Sin embargo, podemos observar que estas cantidades muestran discontinuidades drásticas cuando se alcanza el RID y se pierde la saturación, este resultado es análogo al que se ha reportado para cúmulos pequeños [16]. Se puede observar que el pico pronunciado que, para $J > J_0/4$, aparece centrado en ~ 7.5 ahora se dispersa considerablemente, mientras que su máximo crece notablemente en un factor de ~ 0.8 . En el caso particular del Fe se observa que, mientras en el RIF, la EAM era pequeña, ahora se obtiene un valor cercano a 2 meV con una dirección preferencial en el plano.

Dado que ahora el sistema ya no retiene ninguna semejanza con el carácter atómico de sus componentes, la posición de la energía de Fermi (ϵ_F) y los efectos de hibridación entre estados cercanos a la ϵ_F , que introduce el AEO, adquieren mayor importancia. Ya que el AEO está modulado por el parámetro ξ , es importante estudiar como cambian las propiedades magnéticas en función de este parámetro. Por esta razón se ha procedido a calcular la EAM en función de ξ en las aproximaciones de intercambio constante y variable,

en los regímenes de intercambio fuerte, medio y débil.

3.4 Validez de la teoría de perturbaciones

La teoría de perturbaciones [22] predice algunas tendencias sobre la dependencia de la EAM en el parámetro de AEO, así como algunas de las características de las contribuciones del momento angular orbital, sin embargo, estos resultados fueron obtenidos para monocapas suspendidas, por lo que varios autores [46, 38] han cuestionado la aplicabilidad de este modelo cuando, por un lado se consideran sistemas formados por átomos más pesados, donde el AEO ya no es pequeño y, por otro lado en sistemas que presentan interfases entre películas delgadas magnéticas y no magnéticas. En este sentido, a partir de los cálculos realizados de la EAM y las contribuciones magnéticas $\langle S_z \rangle$ y $\langle L_\delta \rangle$, se ha establecido una comparación con las predicciones de la teoría de perturbaciones con el fin de establecer la validez y limitaciones de este enfoque.

De la teoría de perturbaciones se obtiene un resultado muy interesante [22]: al despreciar las interacciones entre espines antiparalelos, se encuentra que $\Delta E = E_\delta - E_\gamma$ es aproximadamente proporcional a la diferencia entre las proyecciones del momento angular orbital en cada una de las direcciones de magnetización consideradas $\Delta L = L_\delta - L_\gamma$. En las figuras 3.5 (3.6) se muestran los resultados obtenidos a partir de la aproximación de intercambio constante (CIC) considerando un corrimiento de intercambio fuerte (débil) para (a) las proyecciones del momento orbital correspondiente a cada una de las direcciones de magnetización consideradas, (b) la diferencia de estas proyecciones y, (c) la EAM obtenida en cada caso.

Como se puede ver al comparar (fig 3.5) (c) la EAM con (b) ΔL se observa que en el RIF estas curvas son muy parecidas, pero al comparar estas cantidades cuando el sistema está en el RID se observa (fig3.6) que gran parte de la semejanza entre estas curvas desaparece. Resultados completamente equivalentes se encuentran para los cálculos realizados en la aproximación del corrimiento de intercambio variable (CIV). En las figuras 3.9 (3.10) se muestran los resultados obtenidos en esta aproximación considerando un corrimiento de intercambio fuerte (débil) para (a) las proyecciones del momento orbital, correspondiente a cada una de las direcciones de magnetización consideradas, (b) la diferencia de estas proyecciones y, (c) la EAM obtenida en cada caso. De estos resultados se infiere que la validez de este resultado está restringido a sistemas en el RIF. Ya que la hibridación con el sustrato crea hoyos en la banda mayoritaria mediante la reducción de la magnetización, las interacciones entre espines antiparalelos pueden ser más importantes en sistemas caracterizados por interacciones de intercambio débiles, por lo que se debe tener cuidado al aplicar este

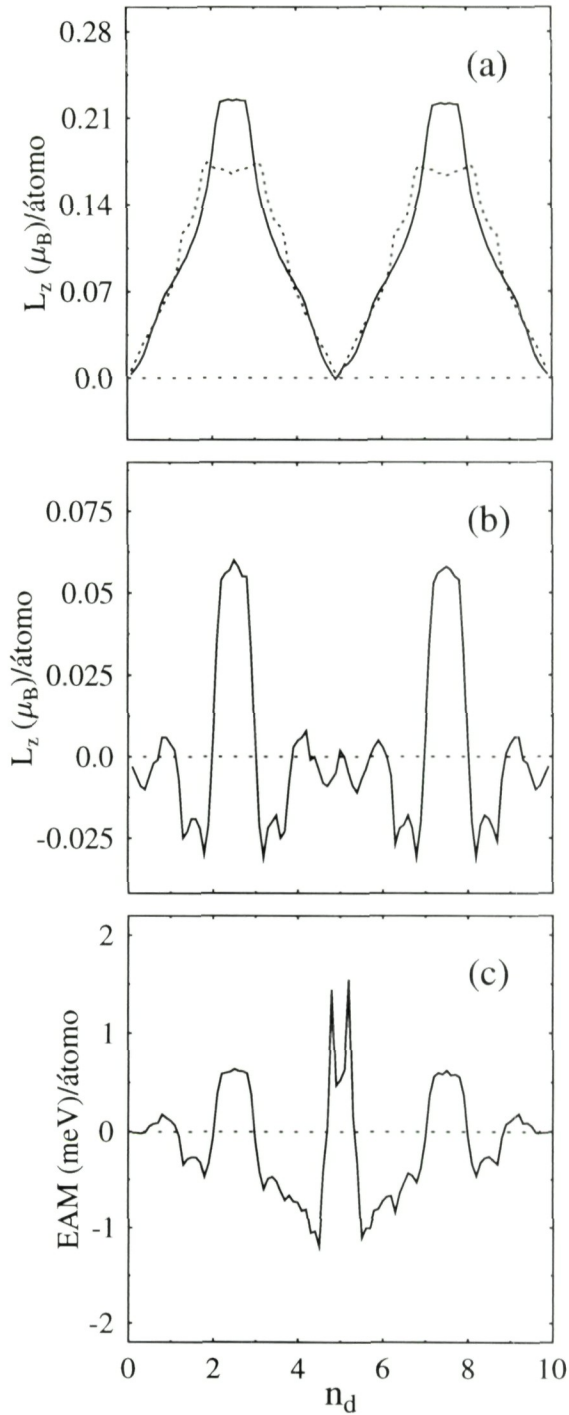


Figura 3.5: (a) Proyección del momento angular L_δ para una dirección de magnetización δ perpendicular (continua) y paralela (punteada), (b) Su diferencia y (c) EAM vs n_d para intercambios fuertes (Fe, $n_d = 7$) en una monocapa bcc(001) considerando 100 niveles en la FC.,

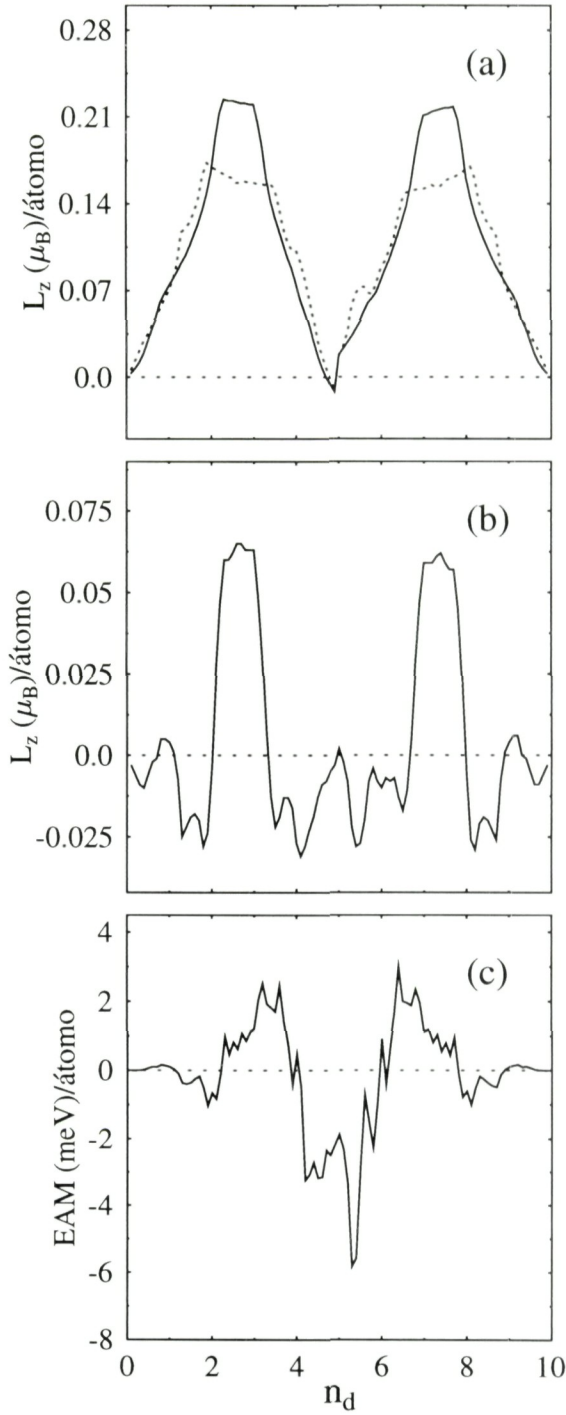


Figura 3.6: (a) Proyección del momento angular L_δ para una dirección de magnetización δ perpendicular (continua) y paralela (punteada), (b) Su diferencia y (c) EAM vs n_d para intercambios débiles (Fe' , $n_d = 7$) en una monocapa bcc(001) considerando 100 niveles en la FC.,

resultado perturbativo.

En relación a la dependencia de ΔE en ξ , la teoría de perturbaciones no degenerada predice que ésta es cuadrática $\Delta E(\xi) \sim \xi^2$ [22]. Sin embargo, en el caso de bandas degeneradas, el rompimiento de la degeneración, debido al AEO, complicará esta situación. Con el fin de estudiar con más detalle esta dependencia, se realizaron cálculos de la EAM en las aproximaciones de CIC y CIV variando ξ para $n_d = 7$. En las figuras 3.7 y 3.11 se resumen estos resultados. En ambos casos (CIC y CIV) se observa que la EAM tanto para intercambios (a) fuertes y (b) débiles presenta las mismas tendencias: en todos los casos se observa que la EAM es una función creciente de ξ . Para ver si esta dependencia es cuadrática se ha procedido a graficar la EAM escalada a ξ^2 contra ξ , tal que, de cumplirse el resultado perturbativo, se deben obtener rectas horizontales. En las figuras 3.8 y 3.12 se muestran los resultados correspondientes a las aproximaciones CIC y CIV respectivamente. Como se puede ver, en ninguno de los intercambios considerados: (a) fuerte y (b) débil, se observa que la dependencia sea cuadrática. En este sentido, también se probaron otras dependencias (ξ^3 y ξ^4) pero sin ninguna suerte. Sin embargo, al considerar casos en los que la EAM es grande, se observó que, a excepción de ligeras variaciones, se obtienen resultados que obedecen una dependencia cuadrática como se puede observar en la figura 3.8 (c).

Estos resultados sugieren que la dependencia de la EAM es más complicada en multicapas, por lo que se debe restringir el uso de este enfoque a sistemas que estén en el RIF.

3.5 Papel de la Autoconsistencia

Los resultados anteriores muestran que la presencia del sustrato afecta fuertemente las propiedades magnéticas. En particular, al reducir el corrimiento de intercambio (incrementar el ancho de banda) la EAM muestra cambios muy significativos y discontinuos cuando el momento magnético puede pasar de su estado de saturación a un estado no saturado. En particular, los resultados obtenidos sugieren que el AEO induce efectos de hibridación de los estados cercanos a la energía de Fermi que son más notables cuando el sistema se encuentra en el RID. Es en este punto en que la importancia de determinar autoconsistentemente las distribuciones de carga polarizadas en espín se vuelve evidente.

Debido a que la EAM depende sensiblemente del momento magnético, nos podemos dar una idea de la importancia de la autoconsistencia si comparamos como cambian los valores calculados de ΔE y $\langle S_z \rangle$ con respecto a los valores obtenidos en el cálculo no autoconsistente. En este sentido se han realizado cálculos autoconsistentes del momento magnético y de la EAM para la monocapa bcc(001) de Fe y fcc(111) de Co. Los parámetros que se utilizaron para cada caso, son los que se encuentran tabulados en la tabla III.1.

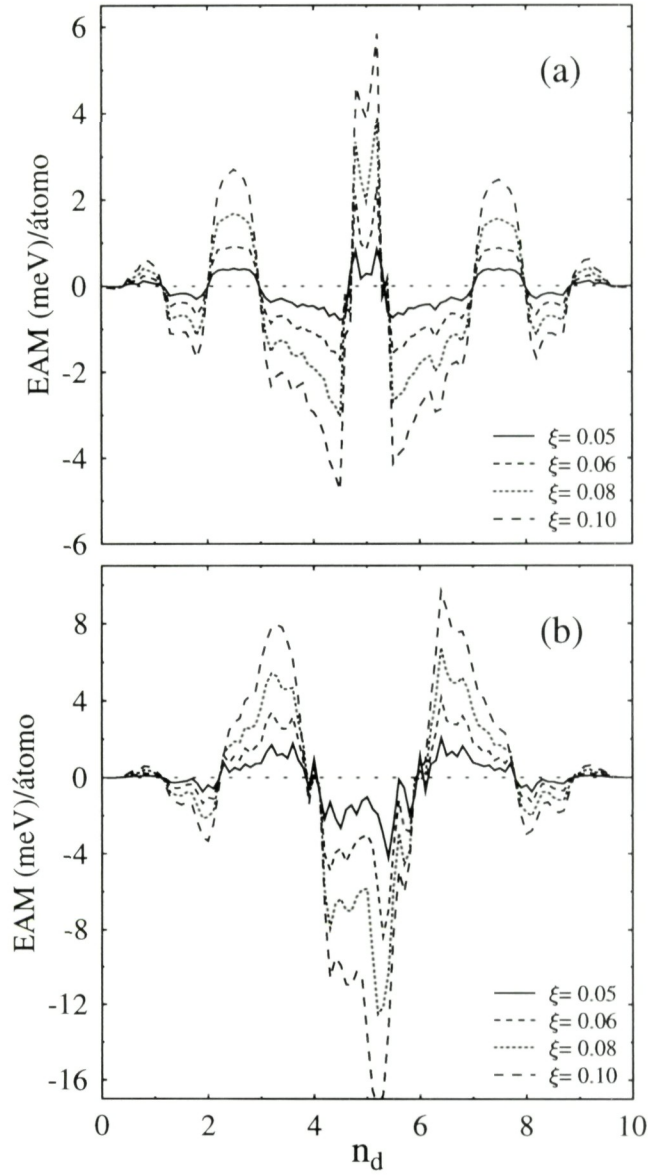


Figura 3.7: EAM vs llenado de la banda d como función del parámetro de AEO (ξ) en el régimen de intercambio (a) fuerte y (b) débil. Los cálculos corresponden a la monocapa Fe(001) tomando 100 niveles en la FC.

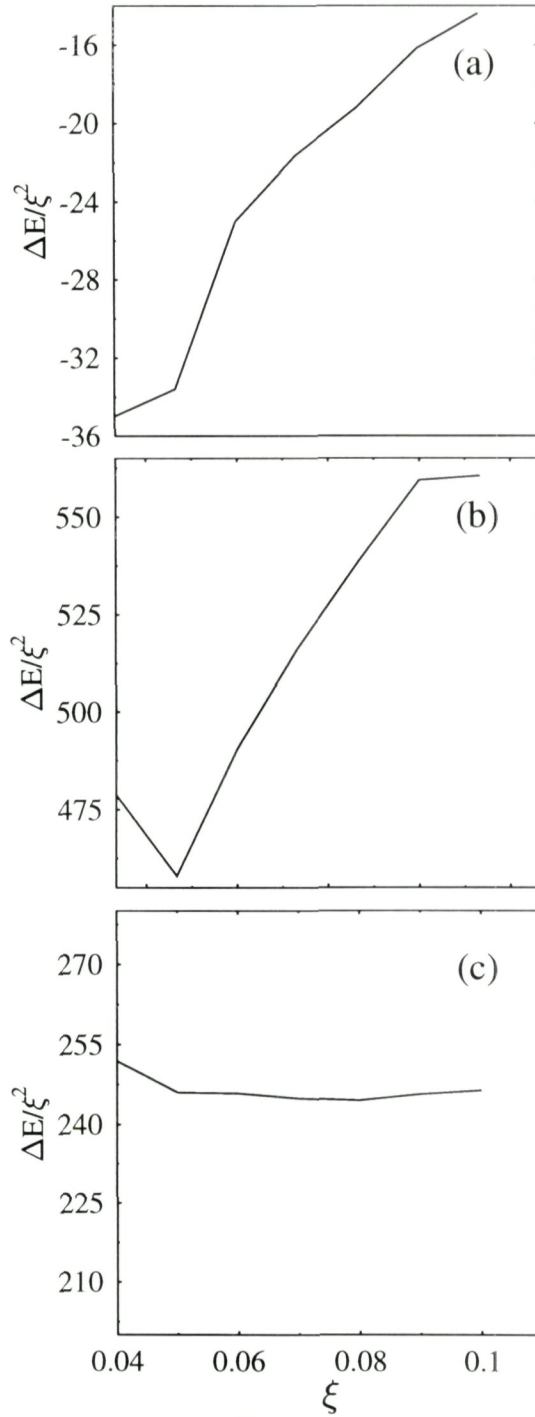


Figura 3.8: EAM escalada a ξ^2 vs. ξ en el régimen de intercambio (a) fuerte y (b) débil. Los resultados corresponden al cálculo con intercambio constante para Fe $n_d = 7$ (a) y (b). En (c) los resultados correspondientes a $n_d = 7.5$ en el RIF.

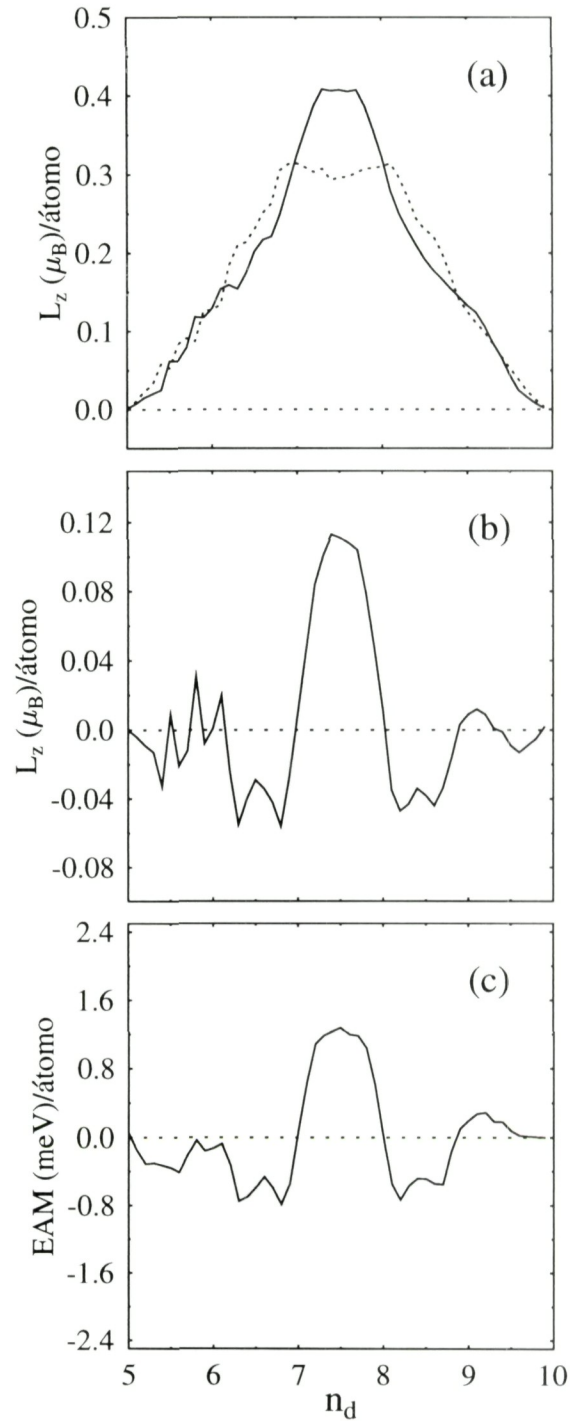


Figura 3.9: (a) Proyección del momento angular L_δ para una dirección de magnetización δ perpendicular (continua) y paralela (punteada), (b) Su diferencia y (c) EAM vs n_d para intercambios fuertes (Fe, $n_d = 7$, J_0) en una monocapa bcc(001) considerando 100 niveles en la FC.,

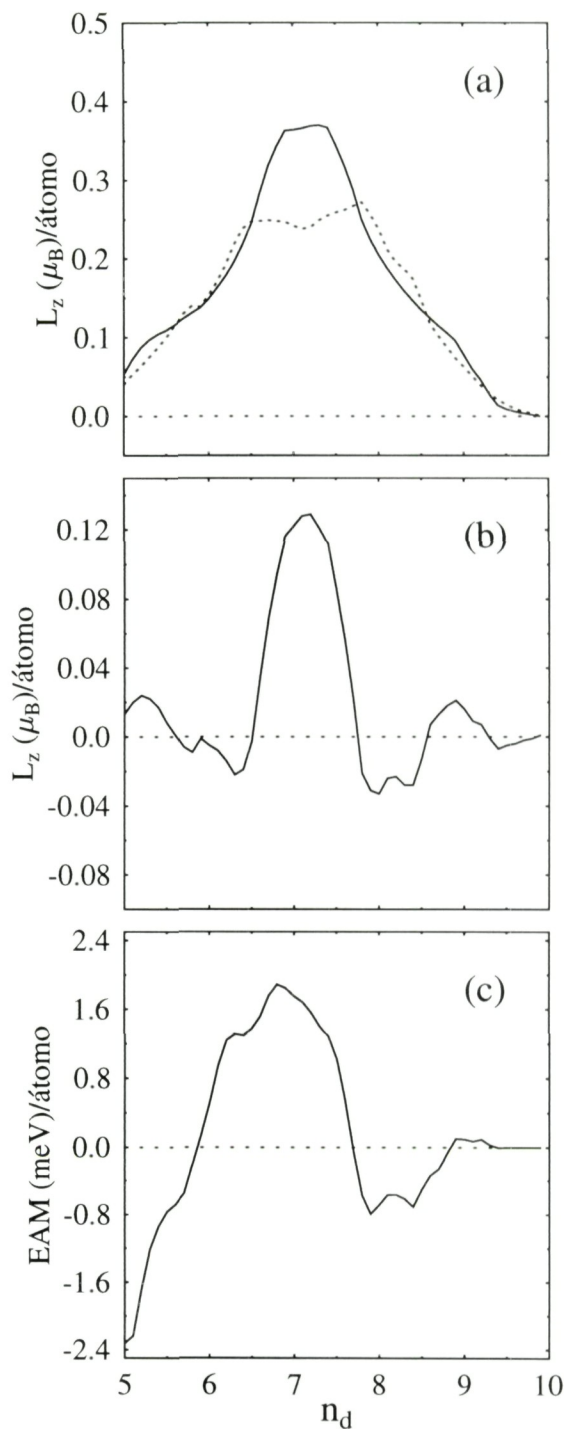


Figura 3.10: (a) Proyección del momento angular L_δ para una dirección de magnetización δ perpendicular (continua) y paralela (punteada), (b) Su diferencia y (c) EAM vs n_d para intercambios débiles (Fe, $n_d = 7$, $J_0/4$) en una monocapa bcc(001) considerando 100 niveles en la FC.,

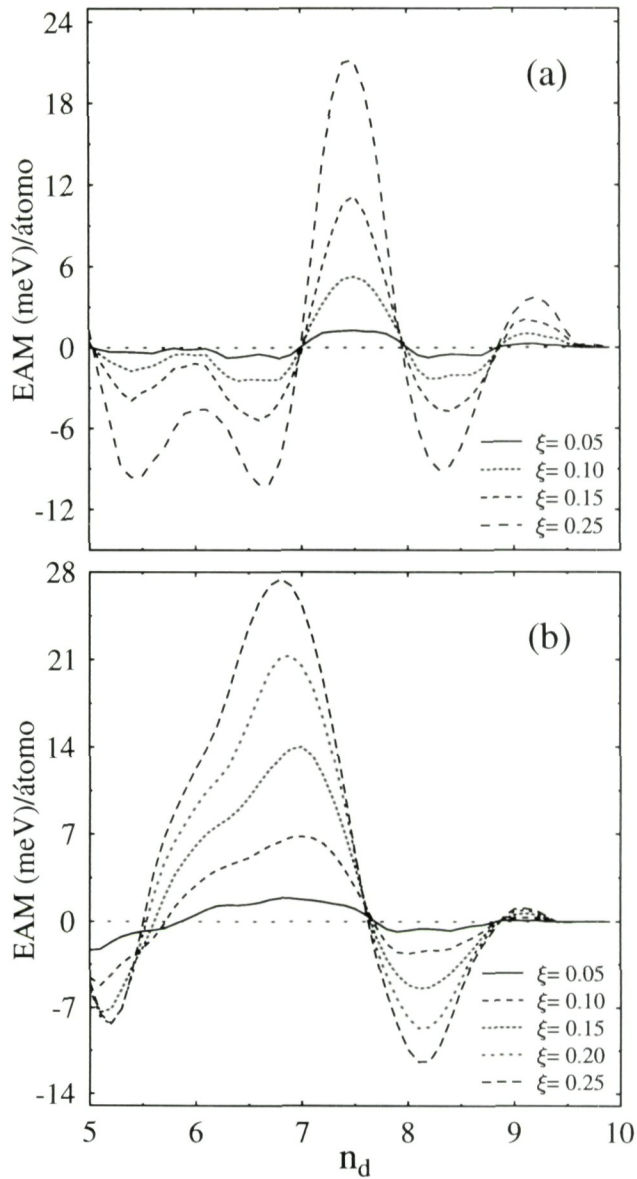


Figura 3.11: EAM vs llenado de la banda d como función del parámetro de AEO (ξ) en el régimen de intercambio (a) fuerte y (b) débil. Los cálculos corresponden a la monocapa Fe(001) tomando 100 niveles en la FC.

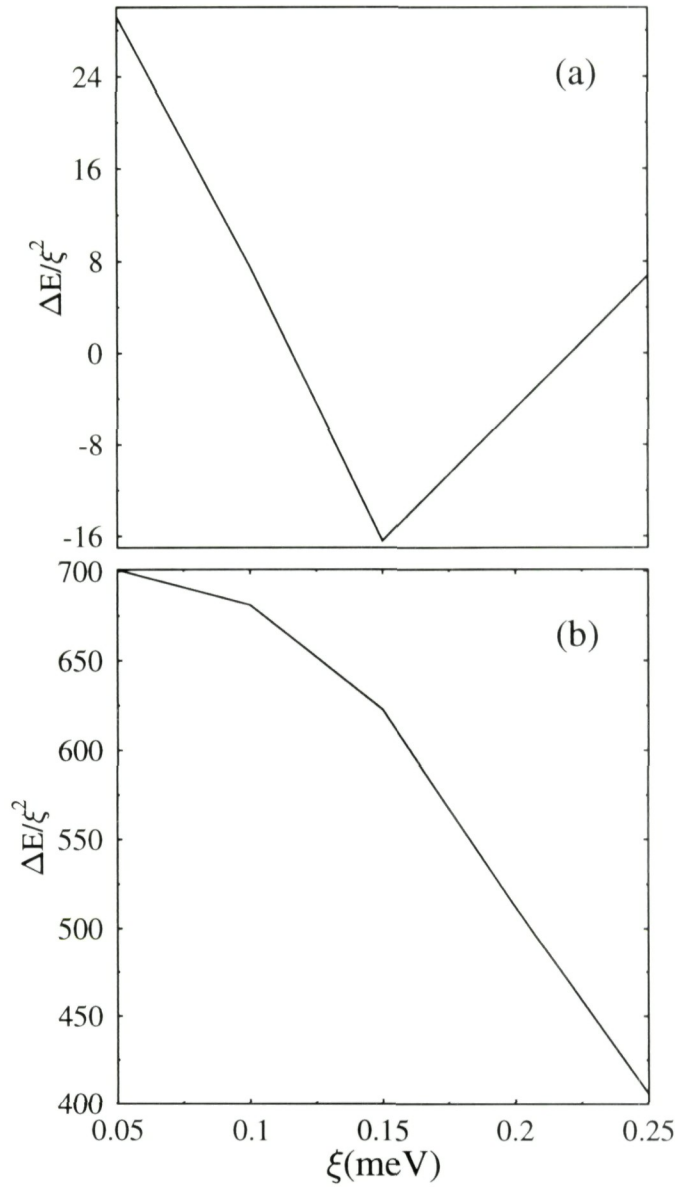


Figura 3.12: EAM escalada a ξ^2 vs. ξ en el régimen de intercambio (a) fuerte y (b) débil. Los resultados corresponden al cálculo con corrimiento variable para Fe ($n_d = 7$) en la monocapa bcc(001) tomando 100 niveles en la FC.

Los resultados obtenidos para el Fe bcc(001) se encuentran resumidos en la tablas III.3, mientras que los correspondientes al Co fcc(111) se muestran en la tabla III.4.

Tabla III.3 Valores del momento magnético y de la EAM propuestos (P) y autoconsistentes (A) para el Fe bcc(001), los parámetros utilizados para el cálculo corresponden a los de la tabla III.1

	n_d	μ_A (μ_B)	μ_P (μ_B)	ΔE_A (meV)	ΔE_P (meV)
Fe	6.8	3.156	3.164	-0.547	-0.390
Fe	7.0	2.929	2.999	0.066	-0.076
Fe'	7.0	2.682	2.583	0.414	1.124
Fe	7.2	2.722		0.565	

Inspeccionando los resultados para el Fe, se observa que, como se esperaba, cuando el sistema se encuentra en el RID (Fe', $n_d = 7$) las diferencias entre los momentos magnéticos propuesto y autoconsistente son considerables, en este caso, un aumento del 3.6 % en μ induce una disminución del 63 % en la EAM, más aún, como se puede observar, aún cuando el momento magnético esta saturado (Fe, $n_d = 7$) se observa que la EAM autoconsistente cambia de signo, respecto a la EAM no autoconsistente. Estos resultados indican que la EAM es mucho más sensible a sutilezas en la estructura electrónica, que el momento magnético.

Para el caso del Co, el resultado más interesante es, tal vez, que para $n_d = 8.2$ se ha obtenido que, con μ no saturado, una reducción de $0.04 \mu_B$ en el momento magnético reduce la EAM por un factor de 3 y, al igual que en el Fe, se puede ver que, aún con el momento magnético saturado, el cálculo autoconsistente de la EAM arroja resultados distintos que, en algunos casos, son pequeños (Co, $n_d = 7.8$) mientras que en otros casos las diferencias pueden ser notables (Co, $n_d = 8.0$).

Tabla III.4 Valores del momento magnético y de la EAM propuestos (P) y autoconsistentes (A) para el Co fcc(111), los parámetros utilizados para el cálculo corresponden a los de la tabla III.1

	n_d	μ_A (μ_B)	μ_P (μ_B)	ΔE_A (meV)	ΔE_P (meV)
Co	7.8	2.198	2.198	0.492	0.316
Co	8.0	1.997	1.997	0.308	0.081
Co	8.2	1.724	1.764	0.269	0.982

Estos resultados muestran hasta que punto la EAM es sensible a pequeñas diferencias en la estructura electrónica. También es claro que los efectos del AEO, aunque son pequeños, pueden modificar la degeneración de los niveles de energía así como su ocupación a $T = 0$ para distintas direcciones de magnetización.

Finalmente, y por completez, en la figura 13 se presentan los resultados correspondientes al Fe obtenidos para la EAM calculada autoconsistentemente como función de ξ para intercambios (a) fuertes y (b) débiles, al igual que en las figuras 3.8 y 3.12, la EAM se ha

escalado a ξ^2 . Como se puede observar, en ninguno de los casos (RIF y RID) se observa que la EAM muestre una dependencia cuadrática en ξ , que corresponde a rectas horizontales. Estos resultados sugieren que la dependencia de la EAM en el parámetro de AEO es más complicada y por lo tanto sería importante en trabajos futuros estudiar con más detalle esta dependencia.

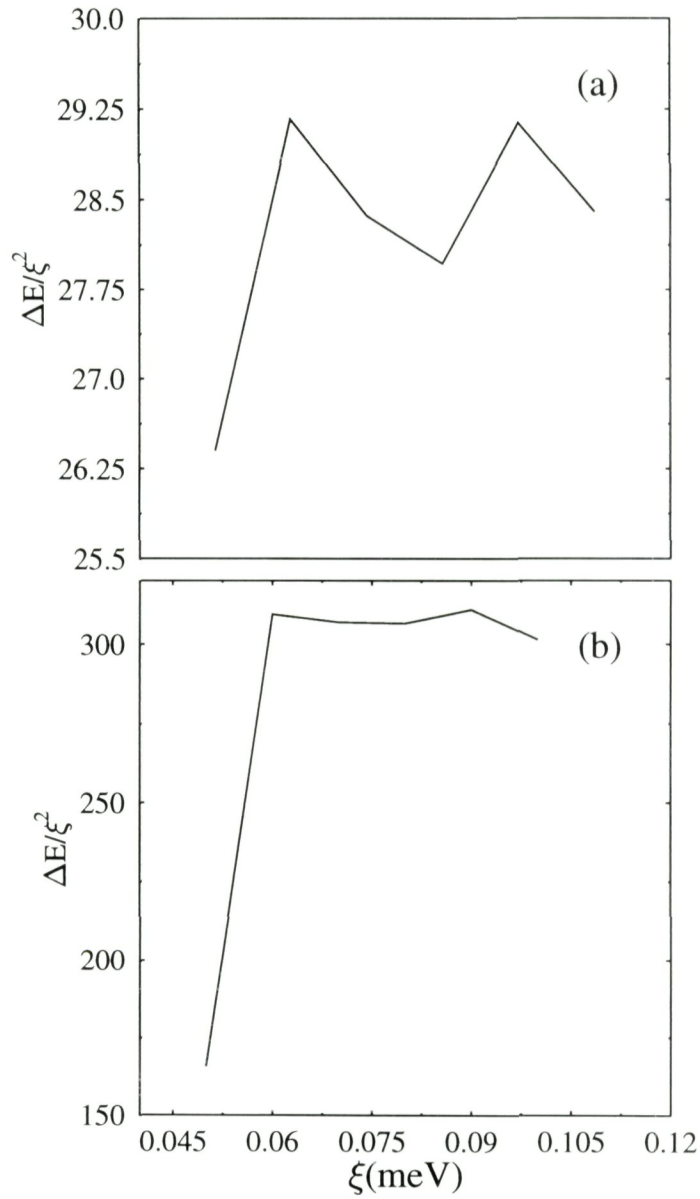


Figura 3.13: EAM escalada a ξ^2 vs. ξ en el régimen de intercambio (a) fuerte y (b) débil. Los resultados corresponden al cálculo autoconsistente para Fe ($n_d = 7$) en la monocapa bcc(001) tomando 100 niveles en la FC.

Capítulo 4

Conclusiones y Perspectivas

El propósito de este trabajo fué el de presentar un modelo teórico basado en los métodos del espacio real, que permitiera calcular la energía de anisotropía magnética en sistemas de baja dimensionalidad de metales de transición $3d$. Con estos fines se introdujo una teoría electrónica tipo amarre fuerte que, en el esquema del método de recursión de Haydock, nos permite manejar con cierta libertad la precisión numérica.

La aplicación del modelo a la monocapa fcc (001) ajustada al sistema Fe/Cu nos ha permitido determinar el número de niveles que se deben considerar en la fracción continua para obtener resultados confiables y precisos, no obstante que las propiedades de convergencia del método de recursión se ven afectadas por el tipo de estructura que se considera, se encontró, gracias a la relación que existe entre el número de niveles en la FC y el número de átomos que se tienen que incluir en la estructura, las condiciones mínimas necesarias para obtener resultados convergentes.

Sobre las tendencias de ΔE , $\langle L_\delta \rangle$ y $\langle S_z \rangle$, los resultados muestran que, en general, al incrementar el ancho de banda (que corresponde a aumentar el parámetro de red del sustrato), la EAM y el momento angular varían continuamente. Sin embargo, se observaron variaciones muy significativas y discontinuas en estas cantidades cuando el momento magnético pierde su saturación, este mismo comportamiento también ha sido observado en cúmulos [16]. Para el momento magnético se observó que, para intercambios débiles, los efectos de la hibridación de los estados cercanos a la energía de Fermi afectan significativamente las propiedades magnéticas. Por lo que la importancia de determinar autoconsistentemente las densidades de carga polarizadas en espín se volvió evidente.

En relación a las tendencias para otros metales de transición (Co, $n_d \sim 8$), se encontró que, a pesar de la geometría sobre simplificada que se ha utilizado (sin relajación de la superficie), los resultados están en acuerdo con observaciones experimentales y con resultados obtenidos por cálculos de primeros principios. En particular, se obtuvo que, tanto el Fe como

el Co se encuentran muy cerca del punto donde el momento magnético se puede invertir y ya que la EAM depende sensiblemente de μ , la determinación precisa de los momentos magnéticos es un punto muy importante.

A partir de los resultados que se han presentado, también fue posible llevar a cabo una comparación con algunos obtenidos por la teoría de perturbaciones, se encontró que cuando el sistema se encuentra en el régimen de intercambio fuerte los resultados perturbativos, en general, son válidos. Sin embargo, al considerar sistemas que están caracterizados por un intercambio débil, se observa que estos resultados no son necesariamente válidos. Esto sugiere que la relación entre el momento orbital, el parámetro de AEO y la EAM es mucho más complicada en multicapas que como se ha predicho para el caso de monocapas suspendidas y por lo tanto estos modelos perturbativos no son estrictamente aplicables. Estos resultados enfatizan, nuevamente, la importancia de determinar con mucha precisión el momento magnético.

Por último se realizaron cálculos autoconsistentes de la distribución de carga polarizada en espín. Comparando con el resto de los resultados, se observó por ejemplo, que en situaciones en que el momento magnético no está saturado se presenta un cambio significativo en ΔE cuando μ varía poco (un aumento en μ del 3.6 % redujo ΔE en 63 %), más aún, se encontraron cambios de signo en ΔE en situaciones en que el momento magnético está saturado. Estos resultados nos llevaron a confirmar lo que otros investigadores han apuntado: la EAM depende sensiblemente de la estructura electrónica y los efectos del AEO, aunque pequeños, pueden modificar la degeneración de los niveles de energía y su ocupación a $T = 0$ para distintas direcciones de magnetización. Este efecto sólo es detectable en un cálculo muy preciso y por lo tanto se concluyó que, independientemente del régimen de intercambio, es necesario realizar cálculos autoconsistentes con el fin de obtener resultados confiables.

En resumen, el modelo ha mostrado ser un medio efectivo para determinar confiablemente la EAM, el estudio sistemático de la anisotropía magnética en monocapas de MT $3d$ ha mostrado una variedad de comportamientos muy interesantes de la EAM como función del tipo de sustrato, del parámetro de AEO y del llenado de la banda d . El resultado más importante es que, debido a la sensibilidad de la EAM en la estructura electrónica y a la sutileza de los efectos que introduce el AEO, es necesario realizar cálculos verdaderamente autoconsistentes para determinar de manera confiable la EAM, por lo que este punto no se debe pasar por alto en futuras investigaciones.

Desde el punto de vista de las perspectivas de este trabajo, lo siguiente es optimizar los esfuerzos de cómputo. De acuerdo a lo que se discutió sobre los problemas de convergencia de la FC se debe señalar que el uso de la base no mixta es necesario para poder hacer el cálculo autoconsistente de las densidades polarizadas en espín, sin embargo, esta base no se

necesita para hacer el cálculo de la energía electrónica cuando se ha introducido el AEO. Entonces una reducción considerable del tiempo de cómputo se puede obtener si: (a) se calcula autoconsistentemente el momento magnético utilizando la base no mixta con pocos niveles y, (b) calculando posteriormente la energía electrónica dependiente de la dirección de magnetización E_δ utilizando la base mixta.

Actualmente existen ciertos problemas que son de mucho interés y que pueden ser abordados con el modelo que se acaba de presentar, sin la necesidad de realizar modificaciones considerables. Consideremos, por ejemplo, el problema de estudiar la llamada *anisotropía en el plano*, esto es, la anisotropía del momento magnético con respecto a varias direcciones cristalinas que se encuentran contenidas en el plano que define la superficie. Ante la posibilidad de poder orientar la magnetización en una dirección determinada dentro del plano, las novedosas técnicas de grabación magnética longitudinal [2, 44] han estimulado una gran actividad, principalmente experimental, por tratar de entender y caracterizar esta anisotropía. En lo referente a algún enfoque teórico de este problema, hasta donde sabemos, no hay trabajo reportado, ya sea perturbativo o bien de primeros principios. Análogamente al caso de la anisotropía perpendicular, al margen de que esta anisotropía pueda provenir de varios efectos [44], el punto de partida es a través de estudiar el AEO, en este sentido, recientemente se ha calculado esta anisotropía en cúmulos de MT y se encontró que, en algunos casos, la anisotropía en el plano puede ser del mismo orden de magnitud que la calculada *fuera* del plano. Nuevamente, en este problema sería interesante estudiar las tendencias de la EAM como función del entorno local, el llenado de la banda d y del parámetro de AEO.

Cabe destacar que en este trabajo únicamente se describe la anisotropía inducida por el acoplamiento espín-órbita, debido a que los sistemas considerados son monocapas de MT. Como se señaló anteriormente, la anisotropía magnética puede ser inducida por varios factores, y bajo ciertas circunstancias, cualquiera de éstas puede ser la contribución dominante. Por ejemplo, posibles extensiones al modelo que pueden ser implementadas, destaca por su importancia, la incorporación de la interacción dipolo-dipolo (IDD), pues como se mencionó, experimentalmente se ha observado que, al crecer películas delgadas sobre sustratos no magnéticos, el momento magnético orientado perpendicular a la superficie, puede invertirse hacia el plano una vez que se alcanza un cierto espesor crítico d_c . El origen de esta transición se ha atribuido a la competencia entre la anisotropía cristalina (AEO) y la anisotropía de forma (IDD) que, por ejemplo en Fe, favorecen, respectivamente, una orientación perpendicular y paralela al plano. Debido a que la magnitud de la IDD depende fuertemente en la estructura, es interesante poder estudiar como cambian las magnitudes de las anisotropías cristalina y de forma conforme se van agregando monocapas del MT. Recientemente Cinal *et al.* [45] han estudiado este problema en el contexto de la aproximación de amarre fuerte,

aunque introduciendo al AEO como perturbación, mientras que Szunyogh *et al.* [46] han realizado un cálculo de primeros principios en el sistema Fe/Au, los resultados que obtuvieron están en acuerdo con los resultados experimentales [5], esto es, el momento magnético se invierte hacia el plano cuando se alcanza un espesor crítico de 6 monocapas.

Este problema puede ser abordado con relativa sencillez a partir del modelo que acabamos de presentar debido a que la IDD puede ser tratada *macroscópicamente*, esto es, se puede calcular de manera independiente a la anisotropía cristalina, en efecto, varios autores han propuesto un modelo muy confiable y sencillo para calcular la anisotropía de forma en multicapas [18, 19]. La idea sería aprovechar que los momentos magnéticos, necesarios para evaluar la IDD, han sido calculados con mucha precisión, con lo cual se podría hacer una descripción muy confiable de la competencia entre estas contribuciones en función del número de monocapas. En este sentido, se debe mencionar que el problema se encuentra en sus primeras etapas de desarrollo.

Apéndice A

El Método de Recursión de Haydock

Se mencionó en el segundo capítulo, que para determinar la estructura electrónica se parte de que existe una relación entre la densidad local de estados y la parte imaginaria de la Función de Green. El problema se reduce entonces, a determinar la función de Green.

Para calcular la función de Green utilizaremos el método de recursión de Haydock [40] que resulta especialmente apropiado cuando modelamos un sistema en términos de una base local, como es el caso de los orbitales atómicos que hemos usado. El método permite calcular cualquier cantidad física que pueda ser expresada como un elemento diagonal del operador función de Green.

La densidad local de estados electrónicos $N_{i\alpha\sigma}$ se calcula en relación al conjunto de orbitales atómicos $\phi_{i\alpha\sigma}$. El método de recursión empieza con la construcción de una nueva base ortonormal u_n , $n = 1, 2, \dots$. El primer elemento, u_0 , se elige arbitrariamente igual a $\phi_{i\alpha\sigma}$, el orbital para el cual se desea calcular la densidad local de estados. Dado u_0 , el siguiente elemento de la nueva base u_1 se define como sigue:

$$b_1 u_1 = H u_0 - a_0 u_0, \quad (\text{A.1})$$

donde H es el hamiltoniano del sistema. De manera similar, la totalidad del conjunto u_n se genera mediante la ecuación

$$b_{n+1} u_{n+1} = H u_n - a_n u_n - b_n u_{n-1}. \quad (\text{A.2})$$

Los coeficientes a_n y b_n sirven para ortogonalizar u_{n+1} en relación con los vectores precedentes u_n y u_{n-1} , respectivamente, b_{n+1} normaliza u_{n+1} a la unidad.

La información esencial necesaria para calcular la densidad local de estados electrónicos se halla contenida completamente en el conjunto de coeficientes a_n y b_n . Para determinar los a_n , se multiplica la ecuación (A.2) por u_n :

$$a_n = \langle u_n | H | u_n \rangle. \quad (\text{A.3})$$

En tanto que, para determinar los b_n , se multiplica (A.2) por u_{n-1} :

$$b_n = \langle u_{n-1} | H | u_n \rangle. \quad (\text{A.4})$$

Las fórmulas (A.3) y (A.4), se aplican solamente cuando se trabaja con un conjunto completo de orbitales atómicos $\phi_{i\alpha\sigma}$.

En la nueva base u_n , el hamiltoniano toma una forma particularmente simple. A partir de las ecuaciones (A.2), (A.3) y (A.4) se tienen los siguientes elementos de matriz:

$$a_n = \langle u_n | H | u_n \rangle, \quad (\text{A.5})$$

$$b_n = \langle u_n | H | u_{n-1} \rangle = \langle u_{n-1} | H | u_n \rangle, \quad (\text{A.6})$$

$$\langle u_n | H | u_m \rangle = 0 \quad \text{si } |m - n| < 1. \quad (\text{A.7})$$

En consecuencia, H tiene la siguiente forma tridiagonal:

$$\begin{pmatrix} a_0 & b_1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_1 & a_1 & b_2 & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & b_2 & a_2 & b_3 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & b_3 & a_3 & b_4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

donde los elementos de matriz situados fuera de la diagonal principal y de las dos diagonales contiguas a ella, son cero. Ahora es fácil calcular:

$$G_{i\alpha, i\alpha}(\epsilon) = \langle u_0 | (\epsilon - H)^{-1} | u_0 \rangle, \quad (\text{A.9})$$

a partir de la matriz:

$$[\epsilon - H] = \begin{pmatrix} \epsilon - a_0 & b_1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_1 & \epsilon - a_1 & b_2 & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & b_2 & \epsilon - a_2 & b_3 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & b_3 & \epsilon - a_3 & b_4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

No se necesita la totalidad de la matriz inversa $[\epsilon - H]^{-1}$, sino únicamente su elemento (A.9). Sobre esta importante particularidad descansa la técnica de recursión. El elemento (A.9) de $[\epsilon - H]^{-1}$ está dado como el cofactor dividido por el determinante, es decir:

$$\langle u_0 | (\epsilon - H)^{-1} | u_0 \rangle = \frac{D_1}{D_0} = \frac{1}{\frac{D_0}{D_1}}, \quad (\text{A.11})$$

en donde D_0 es el determinante completo de $[\epsilon - H]^{-1}$, y D_1 es el determinante de la matriz que se obtiene al remover de $[\epsilon - H]^{-1}$ simultáneamente su primera fila y su primera columna. Ahora es posible escribir

$$D_0 = [\epsilon - a_0]D_1 - b_1^2 D_2, \quad (\text{A.12})$$

en donde D_2 es el determinante de la matriz que se obtiene al eliminar de $[\epsilon - H]^{-1}$ simultáneamente sus primeras dos filas y columnas. Así que la ecuación (A.11) toma la siguiente forma

$$\langle u_0 | (\epsilon - H)^{-1} | u_0 \rangle = \frac{1}{\epsilon - a_0 - \left(\frac{b_1^2}{D_1} \right)}. \quad (\text{A.13})$$

Una relación análoga a (A.12) se cumple para D_n , D_{n+1} y D_{n+2} para toda n , así que se tiene:

$$\frac{D_n}{D_{n+1}} = \epsilon - a_n - \frac{b_{n+1}^2}{D_{n+1}/D_{n+2}}, \quad (\text{A.14})$$

La siguiente fracción continua para los elementos diagonales del operador función de Green se sigue inmediatamente de (A.13) y (A.14) por iteración:

$$G_{x,x}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - a_0 - \frac{b_1^2}{\epsilon - a_1 - \frac{b_2^2}{\epsilon - a_2 - \dots}}}. \quad (\text{A.15})$$

De esta manera, una vez que se han determinado los a_n y los b_n , la fracción continua (A.15) puede ser evaluada muy rápidamente por iteración de (A.14) para cualquier número de valores de ϵ .

Bibliografía

- [1] L.M. Falicov, D.T. Pierce, S.D. Bader, R. Gronsky, K.B. Hathaway, H.J. Hopster, D.N. Lambert, S.S.P. Parkin, G. Prinz, M. Salamon, I.K. Schuller, R.H. Victora, *J. Mater. Res.* **3**, 4497 (1991).
- [2] W. G. Heines, *J. Appl. Phys.* **61**, 3497 (1987).
- [3] R. Allenspach *J. Magn. Magn. Mater* **129**, 160 (1994).
- [4] G. Bochi *et al.*, *Mater. Res. Soc. Proc.* **313**, 308 (1993).
- [5] C. Liu and S. D. Beder, *J. Vac. Sci. Technol. A* **8**, 2727 (1990).
- [6] R. Allenspach and A. Bischof, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3853 (1992).
- [7] C. Liu, E. R. Moog and S. D. Beder, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2422 (1988).
- [8] M. H. Weidmann, B. N. Engel and C. Falco, *J. Appl. Phys.* **76**, 6075 (1994).
- [9] D. P. Pappas, K. P. Kämper and H. Hopster, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 3179 (1990).
- [10] Z.S. Shan, J.X. Shen, R.D. Kirby, D.J. Sellmyer, and Y.J. Wang, *J. Appl. Phys.* **75**, 6418 (1994).
- [11] Z. Q. Qiu, J. Pearson and S. D. Bader, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1006 (1993).
- [12] W. A. de Heer, J. A. Becker, I. M. L. Billas, P. Milani and A. Chatelain, *Int. Jour. of Modern Physics B* **6**, 149 (1992).
- [13] B.D. Cullity, **Introduction to Magnetic Materials**, Addison-Wesley Series in Metallurgy and Materials (1972).
- [14] L. Pareti and A. Paoluzi, **Magnetic Anisotropy**, en *Magnetic Properties of Matter*, editado por G. Asti, D.Fiorani y F. Lucari. World Scientific (1991).
- [15] Š. Pick, J. Dorantes-Dávila, G. M. Pastor and H. Dreyseé, *Phys. Rev. B* **50**, 993 (1994).

- [16] G. M. Pastor, J. Dorantes-Dávila, Š. Pick and H. Dreyseé, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 326 (1995).
- [17] M.L. Neél, *J. de Phys. et el Rad.* **15**, 225 (1954).
- [18] H. J. F. Jansen, *Phys. Rev. B* **38**, 8022 (1988).
- [19] H. J. G. Draaisma and W. J. M. de Jonge, *J. Appl. Phys.* **64**, 3610 (1988).
- [20] A.J. Bennett and B. R. Cooper, *Phys. Rev. B* **14**, 2287 (1971).
- [21] H. Takayama, K. P. Bohnen and P. Fulde, *Phys. Rev. B* **14**, 2287 (1976).
- [22] P. Bruno, *Phys. Rev. B* **39**, 865 (1989).
- [23] J.G. Gay and R. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2728 (1986).
- [24] J.G. Gay and R. Richter, *J. Appl. Phys.* **61**, 3362 (1987).
- [25] Chun Li, A.J. Freeman, H.J.F. Jansen, and C.L. Fu, *Phys. Rev. B* **47** 14932 (1993).
- [26] Ding-sheng Wang, Ruquian Wu and A.J. Freeman *Phys. Rev. Lett.* **70**, 869 (1993).
- [27] Ding-sheng Wang, Ruquian Wu and A.J. Freeman *J. Appl. Phys.* **75**, 6404 (1994).
- [28] Chun Li, A.J. Freeman, H.J.F. Jansen, and C.L. Fu, *Phys. Rev. B* **42**, 5433 (1990).
- [29] A.J. Freeman and C. L. Fu, *J. Appl. Phys.* **61**, 3356 (1987).
- [30] P. Strange, H. Ebert, J.B. Staunton and B.L. Gyorffy, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 3947 (1989).
- [31] G.H.O. Daalderop, P.J. Kelly, and M.F.H. Schuurmans, *Phys. Rev. B* **41**, 11919 (1990).
- [32] G.H.O. Daalderop, P.J. Kelly, and F.J.A. den Broeder, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 682 (1992).
- [33] K. Kyuno, R. Yamamoto and Setsuro Asano, *Jour. Mag. Mag. Mater.* **126**, 239 (1993).
- [34] K. Kyuno, R. Yamamoto and Setsuro Asano, *Jour. Mag. Mag. Mater.* **126**, 268 (1993).
- [35] P. Kocinski and L. Adamowicz, *J. Phys. Chem. Solids* **54**, 983 (1993).
- [36] S. A. Ostanin and V. P. Shirokovskii, *Jour. Mag. Mag. Mater.* **135**, 135 (1994).
- [37] G.M. Pastor, J. Dorantes-Dávila and K. H. Bennemann, *Phys. Rev. B* **40**, 7642 (1989).

- [38] Š. Pick and H. Dreyseé, *Phys. Rev. B* **48**, 13588 (1993).
- [39] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
- [40] **Solid State Physics** vol. 35 Editado por H. Ehrenreich, F. Seitz y D. Turnbull, Academic Press (1980).
- [41] W.A. Harrison, **Electronic Structure of Solids and the Properties of Solids** *The Physics of the Chemical Bond*, ed. Dover (1980).
- [42] R.M. White, **Quantum Theory of Magnetism** (Second Edition), Springer series in Solid State Sciences vol. 32 (1983).
- [43] L.D. Landau y E.M. Lifshitz, **Quantum Mechanics** Vol. 3 Course in Theoretical Physics, tercera edición, Pergamon Press (1991).
- [44] K. E. Johnson, M. Mirzamaani and M. F. Doerner, IBM Storage Systems Division, San Jose, CA. *preprint*.
- [45] M. Cinal, D. M. Edwards y J. Mathon, *Phys. Rev. B* **50**, 3754 (1994).
- [46] L. Szunyogh, B. Újfalussy and P. Weinberger, *Phys. Rev. B* **51**, 9552 (1995).
- [47] S.T. Chui, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3896 (1995).
- [48] T.H. Moos, W Hübner and K. H. Bennemann *sin publicar*.
- [49] R.H. Victora and J.M. MacLaren, *Phys. Rev. B* **47**, 11583 (1993).

EX LIBRIS



SISTEMA DE
BIBLIOTECAS
U.A.S.L.P.

No. DE REG.