

**ANISOTROPIA MAGNETICA DE PELICULAS  
DELGADAS DE COBALTO SOBRE PALADIO:  
 $\text{Pd}_m/(\text{Co})_n/\text{Pd}(111)$**

Tesis que para obtener el grado de  
Maestro en Ciencias  
(Física)

presenta:

**Florentino López Urías**

Instituto de Física  
*Manuel Sandoval Vallarta*  
Universidad Autónoma de San Luis Potosí

27 Septiembre de 1996



UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI  
POSGRADO EN FISICA

TESIS DE MAESTRIA

TITULO: *Anisotropía Magnética de Películas  
Delgadas de Pd<sub>m</sub>/Co<sub>n</sub>/(III).*

NOMBRE DEL ESTUDIANTE: *Fís. Florentino López Urías*

JURADO QUE ACEPTA LA TESIS:

N O M B R E

F I R M A

Dr. Jesús G. Dorantes Dávila (Asesor)

Dr. José Luis Arauz Lara

Dr. Manuel Mirabal García

Dr. José Luis Morán López

Dr. Carlos Amador Bedolla (EQ-UNAM)  
(Examinador Externo.)

Coordinador del Posgrado en Física

FECHA: *27 de septiembre de 1996.*

# Agradecimientos

Al Dr. Jesús Dorantes Dávila por la dirección de esta tesis. Por su ardua y generosa muestra de ayuda y dedicación en el entendimiento y desarrollo de este trabajo.

A mis profesores y compañeros del instituto de UASLP quienes siempre me mostraron un gesto de amistad y confianza.

A mis familiares y amigos en particular a mis padres y a mis hermanos.

Agradezco infinitamente el apoyo económico del pueblo de México, que por medio de Conacyt se me fue apoyado .

para:

mis padres

# Índice General

Resumen	5
Introducción	6
Generalidades	10
<b>1 Anisotropía Magnética</b>	<b>13</b>
1.1 Acoplamiento espín-órbita . . . . .	14
<b>2 Teoría Electrónica de Sistemas de Baja Dimensionalidad de Metales de Transición 3d</b>	<b>18</b>
2.1 El Modelo de multibandas tipo Hubbard . . . . .	19
2.2 Propiedades Magnéticas y Auto-consistencia . . . . .	24
<b>3 Resultados</b>	<b>26</b>
3.1 Propiedades Magnéticas y Energía de Anisotropía Magnética . . . . .	29
3.2 Densidad de Estados . . . . .	39
<b>4 Conclusiones y Perspectivas</b>	<b>46</b>
<b>A Método de Recursión de Haydock</b>	<b>48</b>
<b>B Segunda Cuantización</b>	<b>52</b>
<b>C Anisotropía proveniente de las interacciones dipolo-dipolo</b>	<b>58</b>
Bibliografía	60

# Resumen

En el presente trabajo se calculan las propiedades magnéto-anisotrópicas de películas delgadas de  $\text{Pd}_m/\text{Co}_n/\text{Pd}(111)$  utilizando un Hamiltoniano de amarre fuerte tipo Hubbard en la aproximación de Hartree Fock. Las interacciones de salto, de Coulomb y de espín-órbita fueron consideradas al mismo nivel electrónico. Usando parámetros realistas correspondientes a Co y Pd, se determinan de manera *autoconsistente* la estructura electrónica y las propiedades magnéticas. Los resultados obtenidos muestran que en contraste con películas ultra-delgadas suspendidas de Co, la energía de anisotropía la magnética de  $\text{Co}_n/\text{Pd}(111)$  ( $n \leq 4$ ) es pequeña y la dirección de la magnetización se encuentra dentro del plano. Sin embargo, al agregarle una o más monocapas de Pd, i.e. al considerar el sistema  $\text{Pd}_m/\text{Co}_4/\text{Pd}(111)$  ( $m \geq 1$ ), y suponiendo relajación de la distancia inter-atómica de la interfase Co-Pd la dirección de la magnetización es perpendicular. Además, los momentos magnéticos de Co inducen una polarización de espín en las monocapas de Paladio cercanas a la interfase. Nuestros resultados se discuten y comparan con el experimento. Posibles mejoras a nuestro modelo son también discutidas.

# Introducción

El estudio del magnetismo en el sólido, en el caso de los metales de transición  $3d$ , se ha abordado desde distintos puntos de vista, una de las aproximaciones más sencillas es considerarlos como sistemas perfectamente ordenados. De esta manera, aprovechando todas las simetrías que ofrecen al considerarlos así, los cálculos se facilitan y el tiempo de cómputo se reduce considerablemente.

Los llamados sistemas de baja dimensionalidad (películas, cúmulos, etc.) son sistemas donde se reduce la simetría, lo cual trae como consecuencia la aparición de nuevos fenómenos no observados en el sólido. En particular la llamada anisotropía magnética (AM), definida como la facilidad o dificultad que tiene el material para lograr una saturación en la magnetización en la dirección de un campo magnético aplicado. La energía necesaria para cambiar la dirección de la magnetización del eje difícil a uno fácil es conocida como la energía de anisotropía magnética (EAM).

El estudio de la anisotropía magnética de películas delgadas se ha enfocado de manera preponderante hacia la posibilidad de preparar muestras con una orientación del momento magnético perpendicular a la superficie [1, 2]. Tales sistemas serían fuertes candidatos para la elaboración de dispositivos de grabación magnética de alta densidad. Por este motivo, el crecimiento en direcciones específicas de películas delgadas de materiales ferromagnéticos sobre sustratos no magnéticos ha sido del interés de una gran cantidad de trabajos teóricos y experimentales.

En un trabajo pionero experimental de P.F. Carcia [3] se encontró que para multicapas de Pd/Co, en el rango de películas muy delgadas periódicas, la anisotropía apunta en dirección perpendicular para espesores de Co menores que  $8\text{\AA}$ . La energía de anisotropía es proporcional al espesor de la película de Co y el campo de anisotropía efectiva es inversamente proporcional a este espesor.

Recientes estudios experimentales han mostrado que la dirección de la magnetización para metales  $3d$  puede ser fuertemente influenciada por el sustrato [4, 5, 6]. Bajo esta inquietud Daalderop *et al.* [7] han estudiado teórica y experimentalmente, la aparición de anisotropía magnética perpendicular para multicapas Co/Pd, Co/Cu y Co/Ag. Una de sus conclusiones es de que la EAM es independiente del espesor del cobre y de la plata. También se encontró una ligera dependencia de la EAM en el espesor de Pd debido a la polarización magnética de un número de capas de este sustrato. Con la finalidad de observar el comportamiento del

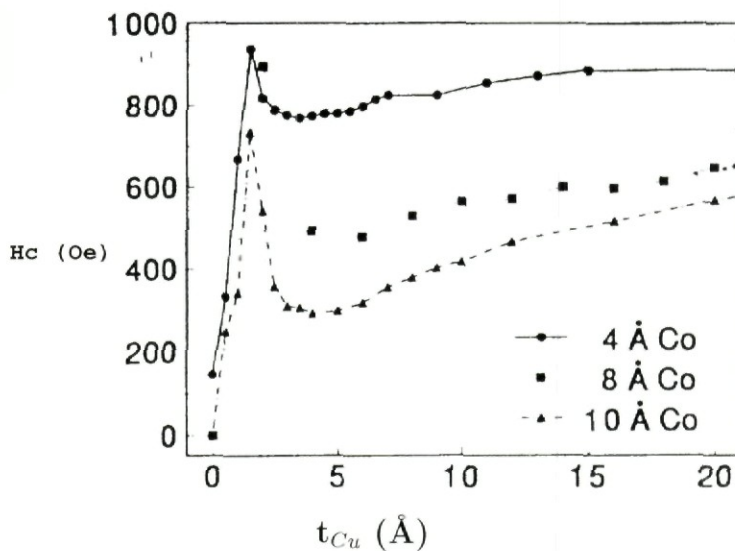


Figura A

Campo de coherividad Vs Cubierta de Cu [10].

sustrato, posteriormente hicieron un estudio de películas delgadas de Co/Ni [8], el motivo de sustituir Ni (ferromagnético) por Pd (paramagnético) fue con el objeto de investigar si la polarización en las capas de Pd causa que la EAM dependa del número de estas capas. Lo que observaron fue que para  $Co_1/Ni_2$  también existe una magnetización perpendicular a la película, estos resultados fueron comparados con  $Co_1/Pd_2$ , mostrando una EAM más alta para el caso del Pd como consecuencia de la fuerte hibridización que existe entre los electrones  $d$  del Co y del Pd, además de que la constante de acoplamiento espín-órbita (AEO) del paladio es mayor que la de níquel. S.T. Purcell *et al.* [9] realizaron mediciones de la anisotropía magnética perpendicular de sistemas de Pd/Co/Pd, crecidas en la dirección (111), variando el ángulo de aplicación del campo magnético para distintos espesores de cobalto.

En estudios experimentales, Engel *et al.* [10] analizaron el comportamiento coersitivo de las películas de un metal de transición sobre cobalto, crecidas en un sustrato de paladio en la dirección (111). Variando el espesor de la película de cobre ( $t_{Cu}$ ), para diferentes espesores fijos de la película de cobalto, encontraron que el campo de coersitividad presenta un pico pronunciado a espesores muy pequeños como lo muestra la figura (A). Variando el espesor de la película de paladio ( $t_{Pd}$ ) encontraron que para diferentes espesores de Co, el pico encontrado en el caso anterior está casi eliminado como se puede observar en la figura (B). Como el comportamiento coersitivo está fuertemente relacionado al comportamiento de la anisotropía magnética, el estudio llevado a cabo por Brad *et al.* sugiere que la aniso-



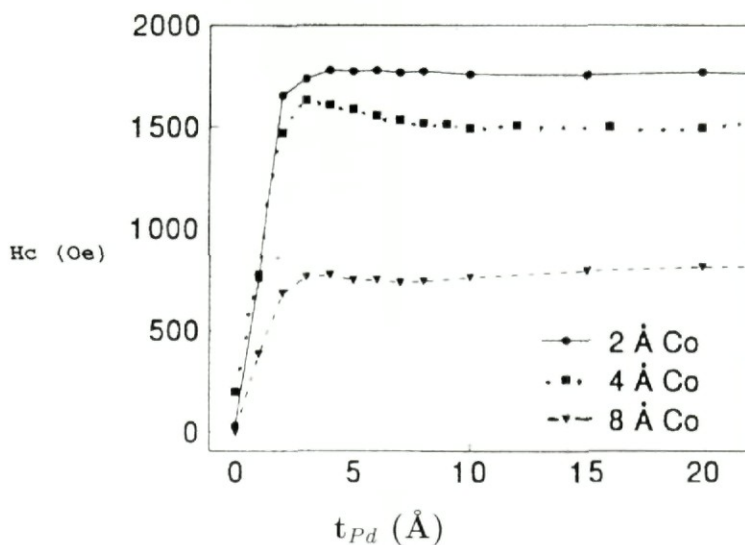


Figura B

Campo de cohercencia Vs Cubierta de Pd [10].

propiedad magnética es importante en la región interfacial, es decir, los cambios en la estructura electrónica afectan el comportamiento magnético entre las capas.

Posteriormente J. Kohlhepp y U. Gradmann [11, 12] trabajando con sandwiches de  $(Pd)_n/Co/Pd$  determinaron el comportamiento de la anisotropía magnética superficial como función de la cubierta de Pd. Ellos encontraron que la anisotropía magnética aumenta monótonamente con el número de capas  $n$  de Pd.

Con respecto a los estudios teóricos sobre multicapas de Co/Pd, cálculos perturbativos de primeros principios [7] predicen la aparición de una orientación perpendicular de la EAM, la cual decrece con el espesor de Co. De todas las multicapas analizadas, la EAM más grande fue encontrada para la multicapa  $(Co)_1/(Pd)_2$ .

Los estudios teóricos anteriores se han centrado sobre sistemas que presentan alguna simetría (e.g. multicapas). Estos estudios están basados en métodos en general perturbativos que requieren del espacio "K" y por lo tanto están restringidos a sistemas con cierta periodicidad. Hasta el momento no se ha realizado un estudio sistemático para entender, por ejemplo, el papel que representa la pérdida de simetría de los átomos y por consiguiente el resultante cambio de la estructura electrónica en la interfase en las multicapas de Co/Pd y su repercusión en la anisotropía perpendicular. Además, es importante hacer notar que Pd tiene una constante de acoplamiento espín-órbita grande comparada con la que tienen el oro, la plata y el cobre. Por otra parte, el Pd no tiene su banda  $d$  llena por lo que adquiere una considerable polarización al ponerse en contacto con el Co, lo cual da una importante contribución a la anisotropía magnética. Los factores importantes que entran en juego en la

determinación de la AM son los efectos interfaciales y los efectos de hibridización. Por otro lado, Cu, Ag tienen su banda  $d$  llena, y la polarización en el espín es despreciable, así su influencia en la anisotropía magnética es por la hibridización  $s-d$  con la banda  $d$  del cobalto, y su interacción espín-órbita no representa un papel importante.

En conclusión, dadas las características del problema (con una baja simetría), un estudio teórico completo sobre estos sistemas tendría que estar basado en el método del espacio real. Debemos recalcar que en los sistemas de baja dimensionalidad el entorno local cambia. Esto trae como resultado una fuerte influencia en las propiedades magnéticas y en particular sobre la energía de anisotropía magnética. Consecuentemente, además de las técnicas de cálculo de la estructura electrónica basadas en el espacio real, se requiere autoconsistencia de la distribución de espín polarizada donde se incluya de manera no perturbativa el AEO como la interacción responsable de la EAM al mismo nivel electrónico que las demás interacciones.

Un método alternativo que responde a las exigencias del problema arriba planteado, es el de considerar un Hamiltoniano de amarre fuerte tomando como modelo un Hamiltoniano de multibandas tipo Hubbard. La estructura electrónica se determina autoconsistentemente en la aproximación de Hartree-Fock no restringida para el espacio real utilizando el método de recursión de Haydock, que a diferencia de los cálculos de primeros principios, no requiere de alguna simetría y con una necesidad de cómputo relativamente pequeña.

En este trabajo utilizaremos esta manera de abordar el problema. El sistema a considerar es el de películas ultra-delgadas de  $\text{Pd}_m/\text{Co}_n/\text{Pd}(111)$ . La EAM es determinada de cálculos auto-consistentes tomando las diferencias entre energías electrónicas obtenidas para los diferentes ejes de cuantización del espín.

Este presente estudio es organizado como sigue: En el capítulo uno se dan los conceptos básicos así como también el esclarecimiento del origen de la AM. En el capítulo dos se desarrolla la teoría necesaria para la obtención de las propiedades magnéticas, la cual reproduce la física en la cual el sistema se encuentra. Posteriormente en el capítulo tres se hace un análisis y discusión de los resultados y por último, en el capítulo cuatro se exponen las conclusiones y perspectivas de este trabajo.

# Generalidades

Las técnicas de estructura electrónica determinan el estado base de un sistema de muchos cuerpos a temperatura cero [1]. Existe una jerarquía de técnicas en las cuales sucesivamente se aproximan más términos al Hamiltoniano, ya sea por modelos físicos o resultados experimentales. En términos generales, las técnicas para calcular la estructura electrónica en sistemas magnéticos se pueden clasificar en dos grupos:

- a) Cálculos de Primeros principios (Funcionales de la densidad).
- b) Cálculos Semi-empíricos (Amarre fuerte).

Cuando se considera el bulto y se quiere estudiar sistemas magnéticos, se encuentra con que el magnetismo (al menos la existencia del momento magnético) se debe al espín y al principio de exclusión de Pauli y más aun, desde hace mucho tiempo se sabe que en sólidos (bulto) con simetría cúbica el momento magnético orbital ( $\vec{L}$ ) es cero (llamado “quenching” of orbitalmoment ) [13]. Esto trae como consecuencia que para calcular el momento magnético total no hace falta incluir en los modelos a L, y con esto solo queda una opción: el momento magnético del espín. Cuando se toma el Hamiltoniano relativista se tienen los términos de siempre, esto es, la energía cinética y energía potencial apareciendo, además, unos términos escalares, llamados correcciones relativistas de Darwin de masa-velocidad. Por último aparece el termino del AEO, que en base a lo anterior ( $L=0$ ), se desprecia. El Hamiltoniano que queda se conoce como, Hamiltoniano escalar relativista. Escalar pues no tiene ningún término vectorial y lo que es más, el Hamiltoniano no depende explícitamente del espín, salvo en que se tiene que tomar en cuenta por el problema de tener un sistema de partículas idénticas (electrones) que deben obedecer el principio de exclusión de Pauli. Como resultado de lo anterior, para obtener el momento magnético, sólo se necesita un Hamiltoniano escalar relativista e incluir el espín de manera indirecta para construir funciones de onda antisimétricas. Como conclusión el Hamiltoniano no depende del espín, la solución de la ecuación de Schrödinger sólo permite determinar las funciones de onda espaciales, mientras que las espinoriales quedan libres y se deben escoger de tal manera que hagan la función de onda total, producto de la función espacial por la función espinorial, antisimétrica.

Por otra parte, los trabajos de primeros principios siempre toman en cuenta esas contri-

buciones relativistas escalares. Mientras que en un cálculo de amarre fuerte, estas contribuciones, aunque no se ponen explícitamente, quedan consideradas a la hora de tomar los parámetros. Por ejemplo, en el Hamiltoniano que se usa en la teoría de amarre fuerte: se tiene que  $H = H_o + H_I$ , en  $H_o$  se genera una constante "epsilon", dentro de esa constante quedan incluidas las funciones espinoriales. Al utilizar un Hamiltoniano escalar relativista, la dirección de cuantización o eje de cuantización no es importante, ya que el Hamiltoniano no es vectorial. Lo único que se puede determinar son cantidades que no dependen del acoplamiento espín-órbita, que es el primer término relativista vectorial que aparece.

En resumen, al despreciar el acoplamiento espín-órbita (AEO) (lo cual es válido si sólo se desea conocer el valor del momento magnético), el Hamiltoniano es escalar, depende del espín sólo indirectamente para satisfacer el Principio de exclusión de Pauli. Este Hamiltoniano escalar relativista, sólo permite calcular propiedades magnéticas no vectoriales tales como magnitud del momento magnético, la temperatura de Curie, etc.

En los últimos años las técnicas experimentales han permitido caracterizar sistemas magnéticos de baja dimensionalidad. En estos sistemas se han encontrado una serie de fenómenos que nunca se habían observado en el bulto, uno de estos fenómenos es la aparición en películas delgadas de una anisotropía magnética uniaxial, perpendicular al plano. Para estudiar el comportamiento de la anisotropía magnética en sistemas de baja dimensionalidad, es necesario incluir el AEO. Esto trae como consecuencia que la dirección de cuantización y la ubicación de los ejes de coordenadas ya no son ignorables, sino que entran explícitamente en la matriz  $\vec{L} \cdot \vec{S}$ , que indica la parte de la interacción espín-órbita.

Desde que Van Vleck (1937) [14] propuso que la anisotropía magnética provenía del AEO, la anisotropía fue estudiada, con un modelo fenomenológico que tuvo y tiene validez, desarrollado por Louis Neel (1954)[15].

Desde el punto de vista de una teoría electrónica, el primer trabajo reportado sobre el tema es de Brooks [16]. Otro trabajo reportado años más tarde fué el de Abate y Adsente [17]. Los siguientes trabajos fueron durante la década de los setentas: Bennet *et al.* [18, 19]. Finalmente, en 1986 Gay y Ritcher [21] , mostraron cómo calcular la anisotropía magnética por primeros principios. Desde entonces, el problema de la anisotropía se redujo durante un tiempo, a un problema numérico. Los resultados son bastantes, sin embargo, los distintos enfoques seguidos para calcular EAM los podemos clasificar de la siguiente manera :

- 1) Cálculos *ab initio* 'spin-polarized total energy calculations' incluyendo el AEO autoconsistentemente dentro de la aproximación escalar relativista R Lorenz y J Hafner [22].
- 2) *ab initio* autoconsistentes e incluyendo después el AEO como perturbación.
- 3) El 'state tracking method' propuesto en 1993 por Freeman *et al* [23]

- 4) Amarre fuerte e incluyendo el AEO como perturbación, Bruno, Takyama y Bennet [6, 18, 19, 20]
- 5) Fully Relativistic Spin Polarized total energy calculations de Weinberger *et al*[24] .
- 6) Amarre fuerte auto-consistente incluyendo el AEO, que es el método que utilizamos en este trabajo [25, 26, 27, 28].

# Capítulo 1

## Anisotropía Magnética

Generalmente, para una descripción de las propiedades básicas de los materiales ferromagnéticos, el espín es introducido de una manera *ad hoc*, de tal manera que hay libertad absoluta en escoger el eje de cuantización: en otras palabras, la mecánica cuántica no relativista conduce a una descripción del ferromagnetismo en la cual la energía libre del sistema es independiente de la dirección de magnetización (se dice que es isotrópica). Esto está en contradicción con la experiencia, la cual nos dice que la magnetización generalmente apunta en alguna dirección privilegiada con respecto a los ejes cristalinos y/o la forma externa del cuerpo. Esta propiedad es conocida como anisotropía magnética.

Un factor que puede fuertemente afectar la forma de las curvas de magnetización  $M$  y el campo magnético  $H$  o las formas de las curvas de histéresis, es la anisotropía magnética. Este término simplemente significa que las propiedades magnéticas dependen de la dirección en la cual se miden. El conocimiento de la anisotropía es la clave para entender las propiedades de estos materiales.

Hay diferentes tipos de anisotropía [29]:

- 1-anisotropía cristalina,
- 2-anisotropía de forma,
- 3-anisotropía de esfuerzos,
- 4-anisotropía inducida,
- 5-anisotropía de intercambio.

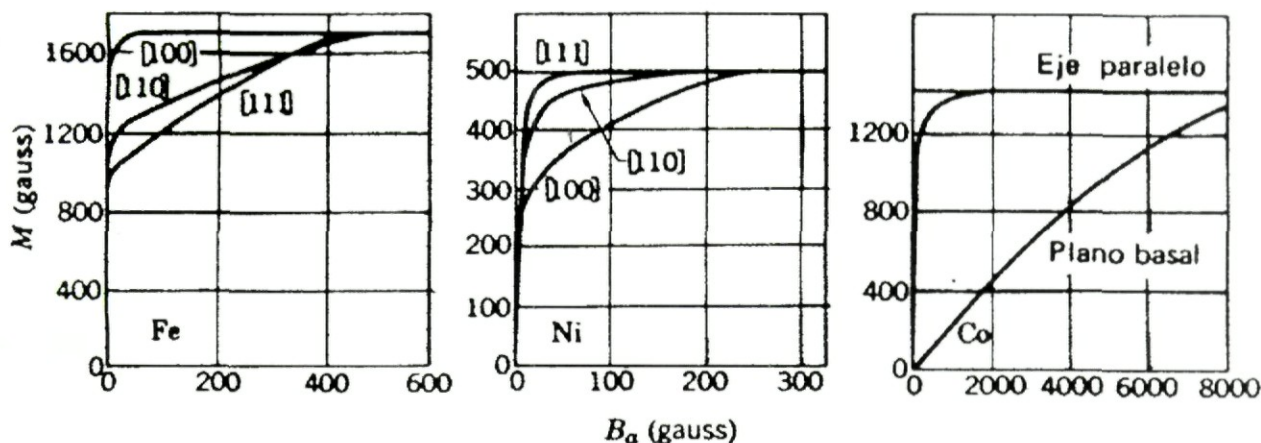


Figura 1.1

Magnetización  $M$  Vs Campo magnético  $B_a$  en las distintas direcciones para Hierro, Níquel y Cobalto de izquierda a derecha respectivamente [30].

De todas estas, la anisotropía cristalina es la única que es intrínseca, sin embargo es una costumbre limitarse a los términos inducidos, en este trabajo se consideraran la anisotropía cristalina y la anisotropía de forma.

En la figura(1.1) se puede observar el comportamiento de la magnetización con el campo magnético aplicado en las diferentes direcciones. Para el hierro las mediciones muestran que la saturación se puede llevar con campos relativamente bajos en la dirección  $[100]$ , la cual es llamada la dirección fácil de magnetización. Para Níquel se tiene que el eje fácil de magnetización se encuentra en la dirección  $[111]$  y para Cobalto se encuentra en la dirección paralela al eje  $z$ .

## 1.1 Acoplamiento espín-órbita

El origen físico de la anisotropía cristalina es debido al acoplamiento espín-órbita. Para entender este acoplamiento es necesaria la teoría relativista del electrón descrita por la ecuación de Dirac [32]. En el límite de bajas velocidades (del orden de  $v^2/c^2$ ) la ecuación de Dirac se reduce a la ecuación de Pauli, que es básicamente la ecuación de Schrödinger con correcciones relativistas; el Hamiltoniano de Pauli se escribe como

$$H = \frac{1}{2m}p^2 - e\Phi - \frac{P^4}{8m^3c^2} + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}div\vec{E} + \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\cdot(\vec{E} \times \vec{P}) \quad (1.1)$$

Se tiene que los primeros dos términos corresponden al Hamiltoniano no relativista son la energía cinética y el potencial electrostático del electrón respectivamente. El tercero es la corrección masa-velocidad. El cuarto término es la corrección de Darwin, el cual toma en consideración que dentro de la teoría relativista, el electrón es sensible al campo eléctrico sobre una escala de longitud del orden de la longitud de onda Compton  $\lambda_c = h/mc$ . El tercero y cuarto término son independientes del espín  $S = \sigma/2$ ; estos son frecuentemente combinados para formar el llamado Hamiltoniano escalar relativista. El último término de  $H$  es el acoplamiento espín-órbita. Este puede ser interpretado como el acoplamiento entre el espín del electrón y el campo magnético creado por su propio movimiento orbital alrededor de los núcleos. Como el movimiento orbital mismo está directamente acoplado a la red via el potencial eléctrico de los iones, este término da una contribución a la anisotropía magnetocristalina.

El acoplamiento espín-órbita es esencialmente grande en la vecindad de los núcleos donde, en buena aproximación, el potencial es esféricamente simétrico; entonces el campo eléctrico se escribe como:

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

de tal manera que el término del Hamiltoniano correspondiente al espín se puede escribir como:

$$H_{s.o} = -\frac{e\hbar}{4m^2c^2r} \frac{d\Phi}{dr} \vec{\sigma} \cdot (\vec{r} \times \vec{P}) \quad (1.3)$$

$$H_{s.o} = \xi(r) \vec{l} \cdot \vec{S} \quad (1.4)$$

Como el magnetismo en los metales de transición es debido a los electrones  $d$  es suficiente considerar únicamente la interacción espín-órbita de éstos electrones. Así, finalmente, el acoplamiento espín-órbita se escribe.



$$H_{s.o} = \xi l \cdot s \quad (1.5)$$

Donde  $\xi$ , es la constante de espín-órbita, es el promedio radial de  $\xi(r)$  sobre los orbitales  $d$ .

La constante de acoplamiento  $\xi$  crece de manera proporcional a el cuadrado del número atómico  $Z$ : es decir,  $\xi \propto Z^2$ . Para los metales  $3d$  y  $4d$ ,  $\xi$  es del orden de 50-200 meV. Particularmente para paladio y cobalto tenemos que  $\xi$  es del orden de 0.190 eV y 0.088 eV, respectivamente.

Para iones de metales de transición  $3d$ , el campo eléctrico en la vecindad de los iones (el campo cristalino) rompe la simetría esférica. La energía del campo cristalino es del orden de 1eV, es decir, es más grande comparada con el acoplamiento espín-órbita, la cual puede ser despreciada a primera aproximación debido al campo cristalino. Los niveles de energía más grandes no corresponden a números cuánticos definidos  $m_l$ ; dicho de otra manera, éstos pueden ser etiquetados como  $xy$ ,  $xz$ ,  $x^2 - y^2$ , o  $3z^2 - r^2$ , los cuales corresponden a híbridos de momento orbital opuestos  $m_l$  y  $-m_l$ , tal que el momento orbital neto de estos niveles es cero: El momento orbital se dice que es congelado por el campo cristalino.

Así en ausencia de acoplamiento espín-órbita, el momento magnético de los iones  $3d$  sería puramente momento magnético proveniente de espín, y el factor giromagnético  $g = (2S_z + l_z)/(S_z + l_z)$  sería estrictamente igual a 2. El efecto del acoplamiento espín-órbita es el de remover en parte lo congelado del momento orbital, pero el efecto es relativamente pequeño, y el factor giromagnético  $g$  permanece cercano a 2.

Notemos que los elementos de matriz de  $\vec{l} \cdot \vec{S}$  dependen sobre el eje de cuantización de  $\vec{S}$ , el cual es naturalmente escogido en la dirección de la magnetización. El operador  $l \cdot S$  entoces se escribe [31]

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{S} = \begin{pmatrix} l_\xi & l_+ \\ l_- & -l_\xi \end{pmatrix},$$

donde  $l_+ = l_\xi + l_n$ , ésta es pues una simple forma de calcular explícitamente los elementos de matriz de  $l \cdot S$  entre los orbitales  $d$  ( $xy, x^2 - y^2$ , etc) como función de los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ . Los resultados pueden ser expresados como:

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{S} = \begin{pmatrix} M & N \\ -N^* & M^* \end{pmatrix},$$

donde  $M$  y  $N$  son matrices de  $5 \times 5$  dadas en [31].

## Capítulo 2

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

Los metales de transición no son metales simples. Sus densidades de estado son caracterizadas por una banda estrecha parcialmente llena, superpuesta sobre un amplia banda tipo electrón libre  $sp$ , conforme nos movemos en la serie de la banda  $d$  es gradualmente llena, hasta los metales nobles  $Cu$ ,  $Ag$ , y  $Au$  donde se encuentra llena. Las propiedades de los metales  $d$  son caracterizados por el llenado de la banda  $d$ , que para muchos propósitos, nosotros despreciamos los electrones  $sp$  como primera aproximación.

El ancho de banda  $sp$  está en marcado contraste con la estrechez de la banda  $d$ . La estrechez de la banda  $d$ , especialmente en la serie  $3d$  es una consecuencia de la relativa localización de los orbitales  $d$  comparado con los orbitales externos  $s$  y  $p$ , dado que los orbitales  $d$  son localizados, estos no se traslapan mucho con los orbitales de los átomos vecinos y por lo tanto las integrales de saltos entre los orbitales  $d$  son pequeñas. Esto indica que la descripción de la teoría de amarre fuerte para los orbitales  $d$  es más apropiada que la teoría del electrón libre.

La serie  $3d$  es complicada por la aparición del magnetismo. En una capa parcialmente llena en un átomo libre, la interacción de intercambio entre electrones favorece al alineamiento paralelo de los espines de los electrones. Esta es la base de la primera regla de Hund [32]. Entre átomos libres el principio de exclusión de Pauli requiere que los electrones con espines paralelos se mantengan alejados, lo cual reduce la repulsión coulombica entre ellos. Pero en sólidos estos electrones deben entrar a estados moleculares gigantes y por lo tanto bajan sus energías cinéticas. Si los espines de los electrones permanecen alineados en el sólido el principio de exclusión de Pauli prohíbe que estén más de un electrón en un mismo estado molecular. Hay por lo tanto un balance entre la energía cinética de los electrones, la cual

no favorece el alineamiento de los espines, y la interacción de intercambio la cual favorece el alineamiento y de aquí al magnetismo.

Con el propósito de estudiar el comportamiento físico de sistemas de baja dimensionalidad, desarrollamos una teoría electrónica tipo amarre fuerte. Esta aproximación parece particularmente apropiada para el estudio de propiedades de sistemas de baja dimensionalidad, ya que describe correctamente no únicamente el comportamiento atómico para el bulto sino también los cambios en la estructura electrónica como resultado del ambiente local.

Este formalismo nos permite tratar  $s$ ,  $p$ ,  $d$  electrones al mismo nivel y así pues ser aplicado a una amplia variedad de elementos y compuestos a través de la tabla periódica. Dado que el interés de este trabajo son las propiedades magnéticas, las cuales son obtenidas considerando la banda  $d$ , que al momento de unir los átomos para formar el sólido cristalino presentan un traslape despreciable. Es en este sentido que se dice que la banda  $d$  es estrecha, de aquí la utilidad de la teoría de amarre fuerte que predice las propiedades relevantes del sistema como densidades locales de estado, momento magnético, etc.

## 2.1 El Modelo de multibandas tipo Hubbard

EL modelo de Hubbard es probablemente el modelo más simple que puede ser usado para el estudio de muchos cuerpos en el aspecto de estructura electrónica de la materia condensada [33].

Dicho modelo puede ser pensado para describir la competencia entre el ligamiento químico y la repulsión coulombica de corto alcance, pero en realidad hay una tercera fuerza que complica el problema: El principio de exclusión de Pauli. Los electrones son fermiones y por lo tanto la función de onda debe ser antisimétrica bajo intercambio de cualquiera de dos electrones no como las primeras dos fuerzas, las cuales son básicamente interacciones de corto alcance, la antisimetrización de la función de onda es efectivamente una interacción de largo alcance y es correspondientemente más difícil de trabajar.

La interpretación del modelo de Hubbard es centrada alrededor de la competencia entre estas tres fuerzas y las correlaciones entre electrones que ellos inducen [33, 34, 35]. Las propiedades físicas de los electrones de un átomo cambian cuando llegan a formar parte de un cúmulo, de una superficie o bien del bulto. El método de amarre fuerte parece ser especialmente conveniente para describir los estados electrónicos como una combinación lineal de orbitales tipo atómico  $\phi_i$ . Tomando en consideración los electrones de valencia, el Hamiltoniano de amarre fuerte está dado por:

$$H = H_o + H_I + H_{s_o} . \quad (2.1)$$

El término de un electrón está dado por

$$- \sum_{\substack{ij\sigma \\ \beta\alpha}} t_{ij}^{\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} , \quad (2.2)$$

haciendo la aproximación  $\epsilon_{i\alpha}^o \approx \epsilon_i^o$  lo cual implica que los electrones están al mismo nivel energético independientemente a qué orbital pertenezcan.

$$H_o = \sum_{i\alpha\sigma} \epsilon_{i\alpha}^o n_{i\alpha\sigma} + \sum_{\langle i \neq j \rangle} t_{ij}^{\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} , \quad (2.3)$$

donde  $c_{i\alpha\sigma}^\dagger (c_{j\beta\sigma})$  se refiere al operador de creación (aniquilación) de un electrón con espín  $\sigma$  y sitio atómico  $i$  en el orbital  $\alpha$  ,  $n_{i\alpha\sigma}$  es el correspondiente operador de número electrónico, el subíndice  $\langle i \neq j \rangle$  significa interacción a primeros vecinos. La razón para hacer esta aproximación es que en sistemas de bandas angostas, los electrones tienen su movimiento itinerante muy restringido, debido a que el ancho de banda no es muy grande. Entonces Hubbard supone que el movimiento de cada electrón es el producto de un compromiso entre la interacción coulombica en cada sitio y la energía cinética máxima que pueden tener al momento de saltar. Esta es la manera en que Hubbard plantea considerar la correlación electrónica. Entonces si los electrones tuvieran la libertad de saltar sin restricciones nunca se llegaría a la situación de tener un momento magnético total en un sitio, por esa razón y combinándola con la aproximación de que los únicos términos de coulomb relevantes son aquellos en el mismo sitio es que se puede tener localización electrónica.

$t_{ij}^{\alpha\beta}$  son las integrales de salto del sitio  $i$  y  $j$  dadas por:

$$t_{ij}^{\alpha\beta} = t(R_i - R_j) = - \int d\vec{r} \phi_{i\alpha\sigma}^* h(\vec{r}) \phi_{j\beta\sigma} = (t_{ji}^{\alpha\beta})^* , \quad (2.4)$$

donde  $R_i$  y  $R_j$  son las coordenadas de dos electrones uno en el sitio  $i$  y el otro en el sitio  $j$ ,  $\phi_{i\alpha\sigma}$  es el orbital de un electrón .

$\epsilon_i^o$  es la energía orbital (excluyendo interacción electrón-electrón). El primer término en  $H_o$

describe los electrones en el estado tipo atómico  $i\alpha$ , y el segundo término describe el salto de los electrones entre los átomos vecinos conduciendo a la deslocalización y ganancia de energía cinética.

La parte de la interacción está dada por

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i\alpha\sigma \\ j\beta\sigma'}} U_{i\alpha\sigma,j\beta\sigma'} n_{i\alpha\sigma} n_{j\beta\sigma'} . \quad (2.5)$$

Dado que el potencial de los iones es fuertemente apantallado tomaremos interacción coulombica a un solo sitio dependiendo únicamente del espín,  $U_{i\alpha\sigma,j\beta\sigma'} \approx U_{\sigma\sigma'}$ .

El término de la interacción puede ser reescrito en la forma de aproximación de campo medio usando la identidad

$$n_i n_j = \langle n_i \rangle n_j + \langle n_j \rangle n_i - \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle + (n_i - \langle n_i \rangle)(n_j - \langle n_j \rangle), \quad (2.6)$$

donde  $\langle n_i \rangle$  es el número de ocupación promedio electrónico, con  $i = i\alpha\sigma$ ,  $j = i\beta\sigma'$  reemplazando el término anterior en la expresión para  $H_I$ , obtenemos:

$$H_I = \sum_{i\alpha\sigma} \Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\sigma} - E_{dc} + H_{corr} . \quad (2.7)$$

Aquí  $\Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma}$  representa el cambio promedio del nivel de energía  $i\alpha\sigma$  debido a la interacción electrón-electrón.

$$\Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma} = \sum_{\beta\sigma'}^{\prime} U_{\sigma\sigma'} \langle n_{i\beta\sigma'} \rangle . \quad (2.8)$$

La sumatoria primada indica que los términos  $\alpha = \beta$  y  $\sigma = \sigma'$  son excluidos.

Nótese que la energía de interacción entre electrones  $i\alpha\sigma$  y  $i\beta\sigma'$  aparecen ambas en el cambio  $\Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma}$   $\Delta\varepsilon_{i\beta\sigma'}$ , este doble conteo es corregido por la energía constante  $E_{dc}$  dada por:

$$E_{dc} = \sum_{i\alpha\sigma} \Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma} \langle n_{i\beta\sigma'} \rangle . \quad (2.9)$$

Aquí  $U_{\sigma\sigma'}$  se refiere a la integrales de interacción coulombica entre electrones con espines opuestos ( $U_{\sigma\sigma-} = U_{\uparrow\downarrow} = U_{\downarrow\uparrow}$ ) y con espines paralelos ( $U_{\sigma\sigma} = U_{\uparrow\uparrow} = U_{\downarrow\downarrow}$ ) incluyen intercambio.

El cambio en la interacción queda como:

$$\Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma} = \sum_{\beta\sigma'} U_{\sigma\sigma'} \langle n_{i\beta\sigma'} \rangle, \quad (2.10)$$

$$\Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma} = \sum_{\beta} (U_{\sigma\uparrow} \langle n_{i\beta\uparrow} \rangle + U_{\sigma\downarrow} \langle n_{i\beta\downarrow} \rangle). \quad (2.11)$$

Se tiene que el momento magnético por sitio está dado por:

$$\mu_i = \sum_{\beta} (\langle n_{i\beta\uparrow} \rangle - \langle n_{i\beta\downarrow} \rangle). \quad (2.12)$$

La carga por sitio es

$$\nu_i = \sum_{\beta} (\langle n_{i\beta\uparrow} \rangle + \langle n_{i\beta\downarrow} \rangle). \quad (2.13)$$

Haciendo un poco de álgebra se llega

$$\sum_{\beta} \langle n_{i\beta\uparrow} \rangle = \frac{(\nu_i + \mu_i)}{2}, \quad (2.14)$$

sustituyendo en la expresión para  $\Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma}$

$$\Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma} = (U_{\sigma\uparrow} \frac{(\mu_i + \nu_i)}{2} + U_{\sigma\downarrow} \frac{(\nu_i - \mu_i)}{2}), \quad (2.15)$$

$$\Delta\varepsilon_{i\alpha\sigma} = (\frac{(U_{\sigma\uparrow} + U_{\sigma\downarrow})}{2} \nu_i + \frac{(U_{\sigma\uparrow} - U_{\sigma\downarrow})}{2} \mu_i), \quad (2.16)$$

sustituyendo en  $H_I$

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

$$U_d = U_{\uparrow\downarrow} + U_{\uparrow\uparrow}, \quad (2.18)$$

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

El término de muchos cuerpos queda como:

$$H_{corr} = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha\sigma, j\beta\sigma'} U_{i\alpha\sigma, j\beta\sigma'} (n_{i\alpha\sigma} - \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle) (n_{j\beta\sigma'} - \langle n_{j\beta\sigma'} \rangle), \quad (2.20)$$

describe la energía de interacción electrón-electrón debido a las fluctuaciones de carga del número de ocupación cuántico  $n_{i\beta\sigma'}$  sobre su promedio  $\langle n_{i\beta\sigma'} \rangle$ . Nótese que estas fluctuaciones de carga local causadas por los términos de salto de los electrones  $H_o$  están necesariamente presentes cuando los electrones se deslocalizan.

En la aproximación de Hartree-Fock los efectos de  $H_{corr}$  son despreciados, ésta es una razonable aproximación para cálculos de propiedades del estado base de sistemas con electrones deslocalizados.

La parte correspondiente  $H_{s,o}$  es obtenida tomando en consideración que la dirección de cuantización es tomada paralela a la dirección de la magnetización  $\langle S_z \rangle$ .

$$H_{s,o} = \xi \sum_{i,\alpha\sigma,\beta\sigma'} (L_i \cdot S_i)_{\alpha\sigma,\beta\sigma'} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\beta\sigma'}, \quad (2.21)$$

donde  $(L_i \cdot S_i)_{\alpha\sigma,\beta\sigma'}$  asocia a los elementos de matriz intra-atómicos de  $(\vec{L} \cdot \vec{S})$  entre orbitales  $d$  el cual acopla los estados de espín “up” y “down” que dependen de la posición relativa entre la dirección de magnetización y la estructura de la red.

El Hamiltoniano total queda como:

$$H = \sum_{i\alpha\sigma} \epsilon_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\sigma} + \sum_{\langle i \neq j \rangle, \alpha\beta\sigma} t_{ij}^{\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} - E_{dc} - \xi \sum_{i,\alpha\sigma,\beta\sigma'} (L_i \cdot S_i)_{\alpha\sigma,\beta\sigma'} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\beta\sigma'}. \quad (2.22)$$

Aquí  $\epsilon_{i\alpha\sigma}$  es  $\epsilon_i^o + U_d \mu_i - \sigma \frac{(J\nu_i)}{2}$  lo cual describe la dinámica de cada electrón como si fuera una partícula independiente moviéndose en un campo efectivo  $\epsilon_{i\alpha\sigma}$  generado por los otros



electrones.

La variación angular de las integrales de salto cuando un átomo rota alrededor de otro es muy complicada para las interacciones  $d$ - $d$ ; éstas fueron tabuladas por Slater-Koster [36]. Esta tabla da la variación angular de las integrales de salto entre todas las combinaciones  $s$ ,  $p$  y  $d$ . Se tiene que los valores canónicos varían con el inverso de la quinta potencia de la distancia interatómica  $d_o$ :  $dd(\sigma, \pi, \delta) = (-6, 4, -1)(W_d/2.5)(S/d_o)^5$ . Aquí  $W_d$  es el ancho de banda  $d$  en 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 con simetría distinta. Esto es importante en sistemas de baja dimensionalidad puesto que los cambios en el entorno local inducen cambios en  $\rho_{i\alpha\sigma}(\varepsilon)$  y  $\langle n_{i\alpha\sigma} \rangle$ , que están acoplados. Para los valores de  $U$  y  $J$  se asumen que son independientes del tamaño del sistema, y 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 Propiedades Magnéticas y Auto-consistencia

El número de electrones  $d$  por sitio  $\nu_i$  y momento magnético por sitio  $\mu_i$  correspondiente a la capa  $i$  están dados por:

$$\nu_i = \sum_{\alpha} (\langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle + \langle n_{i\alpha\downarrow} \rangle), \quad (2.23)$$

$$\mu_i = \sum_{\alpha} (\langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle - \langle n_{i\alpha\downarrow} \rangle), \quad (2.24)$$

se determinan auto-consistentemente requiriendo que

$$\langle n_{i\alpha\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \rho_{i\alpha\sigma}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.25)$$

donde  $\rho_{i\alpha\sigma}(\varepsilon)$  se refiere a la densidad local de estados de espín-órbita  $\alpha\sigma$  en el sitio  $i$ , la energía de Fermi  $\varepsilon_F$  (o energía de los estados más altos ocupados) se obtiene del volumen del paladio. La densidad local de estado está relacionada con la función de Green

$$\rho_{i\alpha\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \text{Im}G(r, E). \quad (2.26)$$

De la identidad que se tiene  $G = (E - H)^{-1}$ , entonces básicamente el problema se reduce a encontrar la función de Green del sistema, dicha función se obtiene por medio del método

de recursión de Haydock expuesto en el apéndice A. La energía electrónica  $E_\delta$  de la cual es derivada la EAM es calculada de la forma :

$$E_\delta = \frac{1}{N} \sum_{i\alpha\sigma} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \epsilon \rho_{i\alpha\sigma}(\epsilon) d\epsilon - E_{dc}, \quad (2.27)$$

donde  $\delta$  se refiere a la dirección de la magnetización ( $\delta = x, y, z$ ) y  $E_{dc}$  es la corrección de doble conteo en la interacción coulombica. La EAM es definida como el cambio  $\Delta E$  en la energía electrónica  $E_\delta$  al cambio en la orientación de la magnetización  $\langle S_z \rangle$  con las posiciones fijas de los iones. Por ejemplo,  $\Delta E = E_x - E_z$  es una medida de la estabilidad relativa de la magnetización a lo largo de los ejes  $x$  y  $z$ . El momento magnético orbital se obtiene de la siguiente expresión

$$L_{i\delta} = \sum_{m=-2}^2 m \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \rho_{im}(\epsilon) d\epsilon, \quad (2.28)$$

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 la magnetización  $\langle \vec{S} \rangle$ .

# Capítulo 3

## Resultados

En este capítulo se presentan y discuten los resultados obtenidos para las propiedades magnéticas de películas delgadas de  $\text{Pd}_m/\text{Co}_n/\text{Pd}(111)$ . Utilizando la teoría desarrollada en el capítulo anterior se realiza un estudio sistemático de la anisotropía magnética de la interfase de Co-Pd. Los parámetros usados para los cálculos son determinados como sigue. Las integrales de saltos a dos centros de los electrones  $d$  son dadas por las expresiones canónicas en términos del ancho de banda correspondiente  $W_b$  del bulto [ $W_b(\text{Pd}) = 5.9$  eV, y  $W_b(\text{Co}) = 5.5$  eV]. La integral de intercambio de Coulomb intra-atómica ( $J$ ) para Co se obtiene de tal manera que reproduzca el momento magnético en el bulto a  $T = 0$  [ $J(\text{Co}) = 0.76$ ] eV. Para Pd,  $J$  es tomada de la Ref. [37] [ $J(\text{Pd}) = 0.52$  eV]. Los valores de la constante de AEO,  $\xi(\text{Co}) = 0.088$  eV, y  $\xi(\text{Pd}) = 0.190$  eV, son tomadas de la Ref. [31]. Experimentalmente la distancia a primeros vecinos de Co-Pd ( $d_{\text{Co-Pd}}$ ) no es bien conocida. Por simplicidad, en este trabajo se toma  $d_{\text{Co-Pd}}$  como el promedio entre  $d_{\text{Co-Co}}$  y  $d_{\text{Pd-Pd}}$  [ $d_{\text{Co-Pd}} = d_{\text{Av.}} = (d_{\text{Co-Co}} + d_{\text{Pd-Pd}})/2$ ]. En la Fig. 3.1.1 se ilustra esquemáticamente la geometría del sistema estudiado.

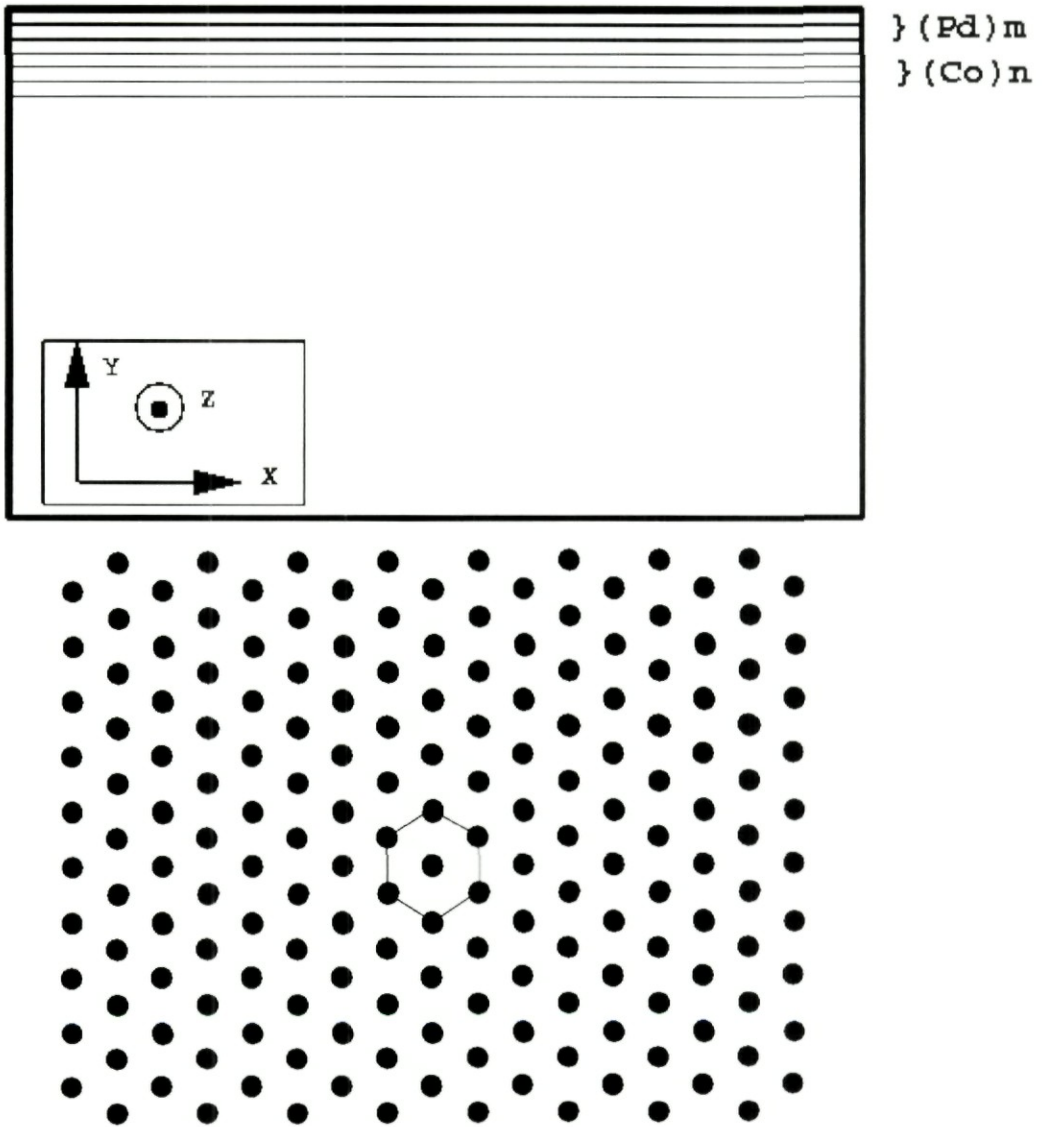


Figura 3.1.1.

Representación esquemática del sistema considerado en nuestros cálculos. La parte superior representa las distintas capas consideradas y la parte inferior el arreglo de átomos en una superficie fcc (111). Los ejes muestran las direcciones de magnetización consideradas.

Una de las características de magnetismo itinerante, en particular para sistema de baja dimensionalidad y sistemas complejos, es el papel que representan las distribuciones de la densidad electrónica de espín asociadas a las cargas con el arreglo geométrico de los átomos. Esta transferencia resulta de la bien conocida fuerte sensibilidad de comportamiento magnético de los metales de transición  $3d$  al entorno local atómico que es esencial para la determinación de la estructura electrónica de estos materiales. Ahora bien, debido a que los efectos de las interacciones del acoplamiento espín-órbita dependen muy fuertemente sobre los detalles del espectro electrónico, se espera que las propiedades magneto-anisotrópicas y especialmente la EAM sea muy sensible a las redistribuciones de carga de espín y a las variables que las definen. Por esta razón, y también con el propósito de cuantificar las contribuciones a la anisotropía magnética que resultan de las consecuentes redistribuciones de densidades electrónicas inducidas por AEO, nuestro objetivo es realizar cálculos auto-consistentes para cada una de las orientaciones de la magnetización y derivar la EAM de una forma no perturbativa, tomando las diferencias entre las energías electrónicas asociadas a cada orientación de la magnetización.

Las densidades de estados electrónicas DOS  $\rho_{i\alpha\sigma}(\varepsilon)$  son obtenidas por medio del método de recursión de Haydock-Heine-Kelly expuesto en el apéndice A. El número de niveles  $N$  de la fracción continua en la expansión de la función de Green es incrementada sistemáticamente hasta que EAM llega a ser independiente de  $N$ . En el presente trabajo nosotros usamos  $N=20-30$  el cual cumple con esta condición. Todos estos coeficientes de recursión son determinados exactamente, es decir, los efectos de frontera no juegan ningún papel en los cálculos. Por lo tanto, un número grande de átomos (aproximadamente 50000-70000) son considerados en nuestro cálculo de espacio real de las  $\rho_{i\alpha\sigma}(\varepsilon)$ . Las ecuaciones autoconsistentes para la distribución de la densidad de espín polarizado son resueltas dentro de un error  $\epsilon$ , el cual es suficiente para asegurar que la determinación de la EAM sea confiable ( $\epsilon < 10^{-10}$  electrones por átomo). La precisión de los cálculos de la energía es incrementada usando una base formada por combinaciones lineales de armónicos esféricos y espinores [5]. Además la estabilidad de la solución es siempre explícitamente revisada, realizando dos cálculos independientes auto-consistentes para cada eje diferente de cuantización del momento angular orbital (es decir diferente base). Dentro de este modelo la aproximación estimada del cálculo de la EAM es aproximadamente  $10^{-6}$ eV.

La energía de Fermi utilizada para los cálculos de las propiedades electrónicas y magnéticas del sistema  $\text{Pd}_m/\text{Co}_n/\text{Pd}(111)$  se obtiene a través de la determinación de la estructura electrónica del volumen de Pd.

### 3.1 Propiedades Magnéticas y Energía de Anisotropía Magnética

Los valores del momento magnético de espín y el momento magnético orbital son obtenidos de cálculos auto-consistentes y son mostrados en las Tablas 3.1.1 – 3.1.6. Ya que el módulo de momento de espín  $|\langle \vec{S} \rangle|$  depende muy debilmente sobre la dirección de la magnetización (típicamente  $|\langle S_x \rangle - \langle S_z \rangle| \simeq 10^{-3} \mu_B$ ) únicamente se dan los resultados correspondientes a la magnetización en el eje  $z$ ,  $\langle S_z \rangle$ .

Los momentos magnéticos de espín local  $\langle S_z \rangle$  muestran diferentes comportamientos para cada capa (ver por ejemplo Tabla 3.1.1). El valor obtenido del momento magnético de la monocapa de Co es casi saturado (i.e.,  $\langle 2S_z \rangle \simeq 10 - n_d$ ) y casi igual al del volumen [ $\langle 2S_z \rangle(\text{sup.}) \simeq 1.67 \mu_B$  y  $\langle 2S_z \rangle(\text{vol}) \simeq 1.68 \mu_B$ ]. Este comportamiento magnético es característico del cobalto, donde se observa una saturación de la banda  $d$ . Uno podría esperar que la reducción del número de coordinación local en la superficie con respecto al volumen y por, consiguiente, una reducción de la banda  $d$  tenga como consecuencia un crecimiento del momento magnético en la superficie. Los resultados, sin embargo muestran una tendencia opuesta  $\langle 2S_z \rangle(\text{vol}) > \langle 2S_z \rangle(\text{sup.})$  para los átomos de Co cercanos a la interfase Co-Pd. Este comportamiento es debido a la hibridización de los orbitales  $d$  de Co y Pd, haciendo ésto que la banda efectiva  $d$  de cobalto aumente. Es de hacer notar la polarización de espín inducida por los átomos de Co sobre los átomos de Pd. Recordemos que el volumen de Pd es no magnético, sin embargo, debido a la presencia de los átomos de Co con un fuerte momento magnético de espín provoca la polarización de los átomos de Pd cercanos a la monocapa de Co. Es de esperarse que esta polarización juegue un papel importante en el comportamiento anisotrópico de la interfase Co-Pd. Estos momentos magnéticos inducidos tienen un valor significativo únicamente en la interfase Co-Pd [ $2\langle S_z \rangle(\text{interface}) \simeq 0.31 \mu_B$ ].

Los valores de los momentos magnéticos de las capas subsecuentes tienden rápidamente a cero. Nótese que de las 4 capas de Pd consideradas en la autoconsistencia, a partir de la segunda capa el valor del momento magnético es aproximadamente cero [ $2\langle S_z \rangle(\text{interface}) \leq 0.03 \mu_B$ ]. Las diferencias asociadas en los corrimientos locales de los centros de gravedad y en la estructura electrónica constituyen un punto muy importante al comportamiento de la anisotropía magnética de la interfase.

Los momentos magnéticos orbitales  $\langle L_\delta \rangle$  ( $\delta = x, z$ ) son en la mayoría de los casos paralelos al momento de espín, como corresponden a elementos de la tabla periódica con más de la mitad del llenado de la banda  $d$  [32].  $\langle L_\delta \rangle$  muestra una dependencia en el entorno local interesante, la cual analizaremos a continuación. Se puede observar que en general  $\langle L_\delta \rangle$  sigue las variaciones de  $\langle S_\delta \rangle$ .

Tabla 3.1.1

Sistema	$2\langle S_z \rangle$	$\langle L_x \rangle$	$\langle L_z \rangle$	$\langle M_x \rangle$	$\langle M_z \rangle$
Co <sub>1</sub> /Pd(111)	0.405	0.0367	0.0330	0.4417	0.4380
$l = 1$	1.667	0.1397	0.1270	1.8060	1.7940
$l = 2$	0.316	0.0440	0.0350	0.3600	0.3500
$l = 3$	0.030	-0.0065	-0.0004	0.0238	0.0306
$l = 4$	-0.007	0.0017	-0.0007	-0.0055	-0.0077
$l = 5$	0.019	0.0044	0.0036	0.0234	0.0219
$\xi(\text{Pd}) = 0$					
Co <sub>1</sub> /Pd(111)	0.4120	0.0336	0.0265	0.4420	0.4380
$l = 1$	1.6670	0.1828	0.1386	1.8490	1.8060
$l = 2$	0.3270	-0.0190	-0.0059	0.3070	0.3215
$l = 3$	0.0240	0.0033	-0.0003	0.0280	0.0380
$l = 4$	-0.0070	-0.0009	0.0004	-0.0081	-0.0039
$l = 5$	0.0310	0.0023	-0.0002	0.0330	0.0310

**Propiedades magnéticas del sistema Co<sub>1</sub>/Pd (111).** El momento magnético del espín  $2\langle S_z \rangle$ , el momento magnético orbital  $\langle L_\delta \rangle$  ( $\delta = x, z$ ) y el momento magnético total  $\langle M_\delta \rangle = 2\langle S_\delta \rangle + \langle L_\delta \rangle$  correspondiente a una orientación de la magnetización perpendicular ( $z$ ) y dentro del plano ( $x$ ) son dadas en magnetones de Bohr, ( $|\langle S_z \rangle - \langle S_x \rangle| \sim 10^{-3} \mu_B$ ). El primer renglón se refiere a los valores promedios.  $l = 1$  se refiere a la capa superficial (Co) y para  $l > 1$  para capas internas (Pd). El segundo conjunto de datos corresponden a cálculos considerando  $\xi(\text{Pd}) = 0$

Comparando los momentos magnéticos de espín y orbital en las diferentes capas vemos que los momentos orbitales  $|\langle L_\delta \rangle|$  más grandes corresponden a los más grandes  $|\langle S_\delta \rangle|$ . En particular,  $|\langle L_\delta \rangle|$  es siempre mayor en las capas más cercanas a la superficie. El momento magnético orbital que corresponde a la capa de Co es mayor que el momento magnético orbital del volumen de Co [ $\langle L_\delta \rangle$  (sup)  $\simeq 0.14$ ,  $\langle L_\delta \rangle$  (vol)  $\simeq 0.11$ ]. Nótese que el crecimiento de  $\langle L_\delta \rangle$  en la superficie no es debido al crecimiento de  $|\langle S_\delta \rangle|$ , ya que en este caso, el momento magnético de espín está casi saturado. Además podemos notar que el valor de  $\langle L_\delta \rangle$  es muy sensible a la orientación de la magnetización ( $\langle L_x \rangle - \langle L_z \rangle \simeq 0.01$ ). También podemos notar que  $\langle L_x \rangle > \langle L_z \rangle$ .

El hecho que el Pd tenga un valor de acoplamiento espín-órbita significativo [ $\xi(\text{Pd}) \simeq 2\xi(\text{Co})$ ] resulta en un efecto importante en las propiedades magnéticas del sistema Co/Pd

(111). Esto puede observarse en la Tabla 3.1.1 donde mostramos en el segundo conjunto de datos, los cálculos autoconsistentes considerando que el Pd tiene un valor de  $\xi(\text{Pd})=0$ . Nótese que el valor del momento magnético de la capa de Pd vecina a la de Co es ligeramente mayor que el valor obtenido cuando se consideró  $\xi(\text{Pd})\neq 0$ . Además el valor de  $\langle L_x \rangle$  ( $\simeq 0.18$ ) que al valor obtenido cuando  $\xi(\text{Pd})\neq 0$  ( $\simeq 0.14$ ). La contribución orbital al momento magnético total es de aproximadamente 8 %.

Como se mencionó en la capítulo anterior, la EAM esta dada por la diferencia de las energías electrónicas  $\Delta E = E_x - E_z$ . En particular, valores positivos de  $\Delta E$  indica una orientación perpendicular de la magnetización. Para el sistema  $\text{Co}_1/\text{Pd}$ , obtuvimos  $\Delta E \sim -0.07$  meV lo cual implica que a bajas temperaturas  $\vec{M}$  se encuentra dentro del plano a la película de acuerdo al experimento. Nótese que para monocapas suspendidas la dirección de la magnetización también se encuentra dentro del plano pero con una energía de anisotropía grande [6, 7, 27]. Este resultado indica que los cambios en la estructura electrónica de la monocapa de Co que resultan de las interacciones monocapa-substrato pueden representar un papel decisivo en éste caso.

El efecto del acoplamiento espín-órbita de Pd es también para el resultado de la energía de anisotropía magnética decisivo. Ciertamente, aparte de un cambio importante en los valores del momento magnético de espín y momento magnético orbital discutido anteriormente, se observa un cambio en el valor de EAM (en este caso,  $\text{EAM}=-0.4$  meV). No obstante, la dirección de la magnetización es la misma que se obtuvo al considerar  $\xi \neq 0$ .

Efectos similares se pueden observar para  $\text{Co}_2/\text{Pd}$  (111) y  $\text{Co}_3/\text{Pd}$  (111) donde las energías de anisotropía magnética son del orden de  $-0.36$  meV,s y la dirección de la magnetización sigue estando dentro del plano de las películas. El momento magnético de la superficie esta casi saturado y es un poco más grande que el obtenido para el volumen y casi igual al del volumen [ $\langle 2S_z \rangle(\text{sup.}) \simeq 1.682\mu_B$  y  $\langle 2S_z \rangle(\text{vol}) \simeq 1.68\mu_B$ ]. Por otro lado, se observa una reducción en el momento magnético de la interfase [ $2\langle S_z \rangle(\text{interface}) \simeq 1.65\mu_B$ ] con respecto a la superficie. Como se discutió anteriormente, esto es debido a los efectos de la hibridización de los orbitales  $d$  de Co y Pd. En estos casos, debido a que el momento magnético de Co en la interfase disminuye con respecto al de la superficie, la polarización de los átomos de Pd en la interfase es menor con respecto al obtenido en el sistema  $\text{Co}_1/\text{Pd}(111)$  [ $2\langle S_z \rangle(\text{interface}) \simeq 0.26 - 0.29\mu_B$ ]. Un resultado interesante es que a medida que el número de capas de Co crece, el momento magnético orbital de la superficie de Co crece [ $\langle L_x \rangle(\text{Co}_1) \simeq 0.14\mu_B$ ,  $\langle L_x \rangle(\text{Co}_2) \simeq 0.143\mu_B$ ,  $\langle L_x \rangle(\text{Co}_3) \simeq 0.152\mu_B$ ].



Tabla 3.1.2

Sistema	$2\langle S_z \rangle$	$\langle L_x \rangle$	$\langle L_z \rangle$	$\langle M_x \rangle$	$\langle M_z \rangle$
Co <sub>2</sub> /Pd(111)	0.6000	0.0469	0.0412	0.6480	0.6410
$l = 1$	1.6810	0.1430	0.1197	1.8230	1.8010
$l = 2$	1.6550	0.1066	0.1125	1.7620	1.7670
$l = 3$	0.2618	0.0339	0.0248	0.2950	0.2870
$l = 4$	0.0075	-0.0065	-0.0077	0.0043	-0.0002
$l = 5$	-0.0036	0.0024	-0.0012	-0.0010	-0.0018
$l = 6$	-0.0014	0.0017	-0.0004	0.0029	-0.0018
Co <sub>3</sub> /Pd(111)	0.7600	0.0590	0.0548	0.8180	0.8150
$l = 1$	1.6840	0.1520	0.1270	1.8360	1.8110
$l = 2$	1.6815	0.1049	0.1083	1.7860	1.7890
$l = 3$	1.6510	0.1205	0.1179	1.7710	1.7690
$l = 4$	0.2880	0.0410	0.0340	0.3280	0.3219
$l = 5$	0.0236	-0.0077	-0.0047	0.0146	0.0189
$l = 6$	-0.0120	-0.0010	-0.0010	-0.0170	-0.0140
$l = 7$	0.0040	0.0029	0.0030	0.0084	0.0075

Propiedades magnéticas de los sistemas Co<sub>2</sub>/Pd (111) y Co<sub>3</sub>/Pd (111). El momento magnético del espín  $2\langle S_z \rangle$ , el momento magnético orbital  $\langle L_\delta \rangle$  ( $\delta = x, z$ ) y el momento magnético total  $\langle M_\delta \rangle = 2\langle S_\delta \rangle + \langle L_\delta \rangle$  correspondiente a una orientación de la magnetización perpendicular ( $z$ ) y dentro del plano ( $x$ ) son dadas en magnetones de Bohr, ( $|\langle S_z \rangle - \langle S_x \rangle| \sim 10^{-3} \mu_B$ ). El primer renglón se refiere a los valores promedios.  $l = 1$  se refiere a la capa superficial (Co) y para  $l > 1$  para capas internas (Pd).

Para el sistema Co<sub>4</sub>/Pd(111) la dirección de la magnetización se encuentra dentro del plano. Por otra parte, aparte de este comportamiento, los valores de los momentos magnéticos y orbitales de este sistema son similares a los obtenidos para los sistemas discutidos anteriormente (ver Tabla 3.1.3). Un punto importante de notar en estos cálculos, es el del número de variables involucradas en la autoconsistencia. Por ejemplo, para el sistema Co<sub>4</sub>/Pd(111) el número de variables a determinar es de 16. Esto nos recuerda que los métodos involucrados en la determinación de la EAM para sistemas de baja simetría deberían de tener una precisión alta.

Tabla 3.1.3

Sistema	$2\langle S_z \rangle$	$\langle L_x \rangle$	$\langle L_z \rangle$	$\langle M_x \rangle$	$\langle M_z \rangle$
Co <sub>4</sub> /Pd(111)	0.8680	0.0620	0.0600	0.9310	0.9290
$l = 1$	1.6850	0.1440	0.1280	1.8270	1.8130
$l = 2$	1.6840	0.1063	0.1120	1.7910	1.7970
$l = 3$	1.6740	0.1120	0.1100	1.7860	1.7850
$l = 4$	1.6420	0.1090	0.1120	1.7520	1.7540
$l = 5$	0.2599	0.0320	0.0230	0.2920	0.2820
$l = 6$	0.0038	-0.0096	-0.0070	-0.0071	-0.0031
$l = 7$	-0.0075	0.0002	0.0023	-0.0097	-0.0051
$l = 8$	0.0090	0.0031	0.0042	0.0137	0.0132
Pd <sub>1</sub> /Co <sub>4</sub> /Pd(111)	0.8030	0.0570	0.0560	0.8620	0.8600
$l = 1$	0.3080	0.0470	0.0450	0.3640	0.3530
$l = 2$	1.6730	0.1140	0.1160	1.7870	1.7880
$l = 3$	1.6750	0.1090	0.1090	1.7850	1.7850
$l = 4$	1.6670	0.1110	0.1090	1.7780	1.7760
$l = 5$	1.6380	0.1110	0.1110	1.7490	1.7500
$l = 6$	0.2559	0.0310	0.0240	0.2890	0.2810
$l = 7$	0.0096	-0.0065	-0.0044	0.0007	0.0051
$l = 8$	-0.0058	0.0019	-0.0011	-0.0056	-0.0069
$l = 9$	0.0091	0.0010	0.0014	0.0112	0.0105

Propiedades magnéticas de los sistemas Co<sub>4</sub>/Pd (111) y Pd<sub>1</sub>/Co<sub>4</sub>/Pd. El momento magnético del espín  $2\langle S_z \rangle$ , el momento magnético orbital  $\langle L_\delta \rangle$  ( $\delta = x, z$ ) y el momento magnético total  $\langle M_\delta \rangle = 2\langle S_\delta \rangle + \langle L_\delta \rangle$  correspondiente a una orientación de la magnetización perpendicular ( $z$ ) y dentro del plano ( $x$ ) son dadas en magnetones de Bohr, ( $|\langle S_z \rangle - \langle S_x \rangle| \sim 10^{-3}\mu_B$ ). El primer renglón se refiere a los valores promedios.

Con el objeto de determinar la influencia del Pd en la dirección de la magnetización, al sistema Co<sub>4</sub>/Pd(111) (este sistema lo escogimos debido a que tiene la EAM más grande dentro del plano) lo cubrimos con una monocapa de paladio [es decir, consideramos el sistema Pd<sub>1</sub>/Co<sub>4</sub>/Pd(111)]. Los cálculos obtenidos muestran que la dirección de la magnetización

es perpendicular al plano. Este resultado esta de acuerdo a resultados experimentales, los cuales indican que la dirección de la magnetización es perpendicular al plano.

**Tabla 3.1.4**

Sistema	$2\langle S_z \rangle$	$\langle L_x \rangle$	$\langle L_z \rangle$	$\langle M_x \rangle$	$\langle M_z \rangle$
Pd <sub>1</sub> /Co <sub>4</sub> /Pd(111) (a)	0.7970	0.0582	0.0575	0.8550	0.8540
$l = 1$	0.2463	0.0373	0.0366	0.2855	0.2829
$l = 2$	1.6730	0.1210	0.1188	1.7950	1.7920
$l = 3$	1.6790	0.1100	0.1100	1.7900	1.7900
$l = 4$	1.6740	0.1110	0.1099	1.7860	1.7850
$l = 5$	1.6510	0.1170	0.1170	1.7680	1.7690
$l = 6$	0.2290	0.0290	0.0210	0.2611	0.2510
$l = 7$	0.0090	-0.0074	-0.0029	-0.0017	0.0061
$l = 8$	-0.0038	0.0009	0.0030	-0.0048	-0.0007
$l = 9$	0.0109	0.0030	0.0036	0.0157	0.0145
Pd <sub>1</sub> /Co <sub>4</sub> /Pd(111) (b)	0.7920	0.0580	0.0576	0.8500	0.8490
$l = 1$	0.2130	0.0320	0.0330	0.2470	0.2460
$l = 2$	1.6740	0.1247	0.1194	1.7990	1.7940
$l = 3$	1.6820	0.1090	0.1109	1.7910	1.7920
$l = 4$	1.6780	0.1110	0.1107	1.7890	1.7890
$l = 5$	1.6570	0.1205	0.1197	1.7770	1.7770
$l = 6$	0.2073	0.0265	0.0186	0.2350	0.2260
$l = 7$	0.0077	-0.0068	-0.0024	-0.0033	0.0052
$l = 8$	-0.0030	0.0011	0.0032	-0.0033	0.0004
$l = 9$	0.0122	0.0034	0.0039	0.0176	0.0161

**Propiedades magnéticas del sistema Pd<sub>1</sub>/Co<sub>4</sub>/Pd.** El momento magnético del espín  $2\langle S_z \rangle$ , el momento magnético orbital  $\langle L_\delta \rangle$  ( $\delta = x, z$ ) y el momento magnético total  $\langle M_\delta \rangle = 2\langle S_\delta \rangle + \langle L_\delta \rangle$  correspondiente a una orientación de la magnetización perpendicular ( $z$ ) y dentro del plano ( $x$ ) son dadas en magnetones de Bohr, ( $|\langle S_z \rangle - \langle S_x \rangle| \sim 10^{-3}\mu_B$ ). El primer renglón se refiere a los valores promedios.  $l = 1$  se refiere a la capa superficial de Pd y para  $2 \leq l \leq 5$  para capas que corresponden a átomos de Co. (a) and (b) se refieren al cálculo usando  $d_{\text{Co-Pd}} = 1.03d_{av}$  y  $d_{\text{Co-Pd}} = 1.05d_{av}$  respectivamente.

Es conocido que en la superficie, los átomos, para ganar energía sufren relajaciones con respecto a la distancia inter-atómica del volumen (contracción o expansión). Al relajar

la distancia inter-atómica de los átomos de la interfase Co-Pd se obtienen los resultados mostrados en la Tabla 3.1.4. La parte (a) de la tabla muestra los resultados considerando una distancia inter-atómica de  $d_{Co-Pd} = 1.03d_{av}$  y la parte (b) considerando  $d_{Co-Pd} = 1.05d_{av}$ . Como se puede observar, dado que la distancia entre los átomos de Co-Pd se incrementa, los momentos magnéticos de Co en las interfaces aumentan con respecto a los valores obtenidos con la distancia sin relajar (ver Tabla 3.1.3). Si uno incrementa la distancia de primeros vecinos entre Co y Pd, la EAM disminuye [EAM( $d_{av}=0.27$  meV, EAM( $d_{Co-Pd} = 1.03d_{av}=0.23$  meV, EAM( $d_{Co-Pd} = 1.05d_{av}=0.19$  meV)]. Esto nos indica que la relajación de los átomos de la interfase Co-Pd juega un papel muy importante en las propiedades magneto-anisotrópicas de estos sistemas.

Tabla 3.1.5

Sistema	$2\langle S_z \rangle$	$\langle L_x \rangle$	$\langle L_z \rangle$	$\langle M_x \rangle$	$\langle M_z \rangle$
Pd <sub>2</sub> /Co <sub>4</sub> /Pd(111)	0.713350	0.050706	0.048691	0.764057	0.761761
$l = 1$	0.013154	-0.001594	-0.007412	0.012851	0.005742
$l = 2$	0.246137	0.031206	0.024960	0.282118	0.271097
$l = 3$	1.642427	0.112197	0.114138	1.753300	1.756565
$l = 4$	1.664322	0.113263	0.108332	1.777675	1.772653
$l = 5$	1.663265	0.112025	0.108060	1.775568	1.771325
$l = 6$	1.637842	0.112374	0.112509	1.750205	1.750351
$l = 7$	0.254372	0.032531	0.024194	0.289266	0.278567
$l = 8$	0.010923	-0.007404	-0.003260	0.000909	0.007663
$l = 9$	-0.006605	0.000238	0.002495	-0.008908	-0.004110
$l = 10$	0.004868	0.002228	0.002892	0.007585	0.007760

Propiedades magnéticas del sistema Pd<sub>2</sub>/Co<sub>4</sub>/Pd. El momento magnético del espín  $2\langle S_z \rangle$ , el momento magnético orbital  $\langle L_\delta \rangle$  ( $\delta = x, z$ ) y el momento magnético total  $\langle M_\delta \rangle = 2\langle S_\delta \rangle + \langle L_\delta \rangle$  correspondiente a una orientación de la magnetización perpendicular ( $z$ ) y dentro del plano ( $x$ ) son dadas en magnetones de Bohr, ( $|\langle S_z \rangle - \langle S_x \rangle| \sim 10^{-3}\mu_B$ ). El primer renglón se refiere a los valores promedios.  $l = 1$  y  $L = 2$  se refieren a las capas superficiales de Pd y para  $3 \leq l \leq 6$  para capas que corresponden a átomos de Co.

Resultados similares se obtuvieron para el sistema  $\text{Pd}_2/\text{Co}_4/\text{Pd}(111)$ . Tabla 3.1.5 muestra los resultados obtenidos para  $d_{\text{Co-Pd}} = d_{\text{av}}$  y en la Tabla 3.1.6 para (a)  $d_{\text{Co-Pd}} = 1.03d_{\text{av}}$  y para (b)  $d_{\text{Co-Pd}} = 1.05d_{\text{av}}$ . En este caso, es necesario hacer un estudio más sistemático de la dependencia de la EAM como función de la distancia interatómica de Co-Pd, ya que nuestros resultados indican que la dirección de la magnetización podría estar dentro o perpendicular al plano ( $\text{EAM} \sim 0$ ).

Tabla 3.1.6

Sistema	$2\langle S_z \rangle$	$\langle L_x \rangle$	$\langle L_z \rangle$	$\langle M_x \rangle$	$\langle M_z \rangle$
$\text{Pd}_2/\text{Co}_4/\text{Pd}(111)$ (a)	0.713441	0.051724	0.050037	0.765671	0.763478
$l = 1$	0.016646	-0.000508	-0.004942	0.018747	0.011704
$l = 2$	0.226628	0.031499	0.022906	0.265264	0.249534
$l = 3$	1.655156	0.117485	0.120799	1.771558	1.775955
$l = 4$	1.673642	0.112865	0.109521	1.786619	1.783163
$l = 5$	1.672626	0.112088	0.109769	1.784885	1.782395
$l = 6$	1.650815	0.118154	0.117692	1.768413	1.768507
$l = 7$	0.227984	0.029444	0.021247	0.259410	0.249230
$l = 8$	0.009477	-0.006980	-0.002751	-0.000969	0.006725
$l = 9$	-0.005512	0.000487	0.002886	-0.007793	-0.002626
$l = 10$	0.006952	0.002703	0.003244	0.010578	0.010196
$\text{Pd}_2/\text{Co}_4/\text{Pd}(111)$ (b)	0.711836	0.051956	0.762212	0.764318	0.762212
$l = 1$	0.019077	0.000190	-0.003385	0.021885	0.015692
$l = 2$	0.210216	0.029922	0.020094	0.248188	0.230310
$l = 3$	1.661101	0.120344	0.123581	1.780503	1.784682
$l = 4$	1.677627	0.112356	0.110111	1.790094	1.787738
$l = 5$	1.676700	0.111833	0.110672	1.788616	1.787372
$l = 6$	1.656826	0.121509	0.120010	1.777624	1.776837
$l = 7$	0.205702	0.026272	0.018591	0.233592	0.224293
$l = 8$	0.007683	-0.006598	-0.002336	-0.003130	0.005347
$l = 9$	-0.005023	0.000691	0.002935	-0.006913	-0.002088
$l = 10$	0.008451	0.003039	0.003489	0.012718	0.011940

Propiedades magnéticas de los sistemas  $\text{Pd}_2/\text{Co}_4/\text{Pd}$ . El momento magnético del espín  $2\langle S_z \rangle$ , el momento magnético orbital  $\langle L_\delta \rangle$  ( $\delta = x, z$ ) y el momento magnético total  $\langle M_\delta \rangle = 2\langle S_\delta \rangle + \langle L_\delta \rangle$  correspondiente a una orientación de la magnetización perpendicular ( $z$ ) y dentro del plano ( $x$ ) son dadas en magnetones de Bohr, ( $|\langle S_z \rangle - \langle S_x \rangle| \sim 10^{-3}\mu_B$ ). El primer renglón se refiere a los valores promedios.  $l = 1$  y  $l = 2$  se refieren a las capas superficiales de Pd y para  $3 \leq l \leq 6$  para capas que corresponden a átomos de Co. (a) and (b) se refieren al cálculo

usando  $d_{\text{Co-Pd}} = 1.03d_{av}$ . y  $d_{\text{Co-Pd}} = 1.05d_{av}$ . respectivamente.

En general, podemos resumir el comportamiento magnético en la interfase a través de las tablas 3.1.7 y 3.1.8. Observamos que en la interfase Co-Pd [ $2\langle S_z \rangle(\text{Pdinterfase}) = 0.31-0.26\mu_B$ ]. Conforme nos vamos adentrando a la película, nosotros observamos una drástica reducción del momento magnético de espín local de Pd. Las capas de Co tienen un momento magnético casi saturado similar al del volumen.

**Tabla 3.1.7**

Sistema	$2\langle S_z \rangle_{\text{Co}}$	$2\langle S_z \rangle_{\text{Pd}}$
Co <sub>1</sub> /Pd	1.67	0.31
Co <sub>2</sub> /Pd	1.66	0.26
Co <sub>3</sub> /Pd	1.65	0.28
Co <sub>4</sub> /Pd	1.64	0.26
Pd <sub>1</sub> /Co <sub>4</sub> /Pd	1.638	0.257
Pd <sub>2</sub> /Co <sub>4</sub> /Pd	1.637	0.254

**Tabla de Valores de  $2\langle S_z \rangle$  en la interfase, las unidades estan en magnetones de Bohr**

**Tabla 3.1.8**

Sistema	$\langle l_x \rangle_{\text{Co}}$	$\langle l_x \rangle_{\text{Pd}}$	$\langle l_z \rangle_{\text{Co}}$	$\langle l_z \rangle_{\text{Pd}}$
Co <sub>1</sub> /Pd	0.1397	0.0440	0.1270	0.0350
Co <sub>2</sub> /Pd	0.1066	0.0339	0.1125	0.0248
Co <sub>3</sub> /Pd	0.1205	0.0410	0.1179	0.0340
Co <sub>4</sub> /Pd	0.1090	0.0320	0.1120	0.0230
Pd <sub>1</sub> /Co <sub>4</sub> /Pd	0.1110	0.0310	0.1110	0.0240
Pd <sub>2</sub> /Co <sub>4</sub> /Pd	0.1123	0.0325	1.1125	0.1241

**Valores de  $\langle l_x \rangle$  y  $\langle l_z \rangle$  de Cobalto y Paladio en la interfase para los distintos sistemas considerados. Las unidades estan en magnetones de Bohr**

Notemos que nosotros no hemos incluido las interacciones dipolo-dipolo (DD) las cuales tienden a estabilizar la orientación de la magnetización en el plano (i.e.,  $\Delta E_{DD} = E_{DD}^x - E_{DD}^z < 0$ ). Para películas con orden ferromagnético (Apéndice C),  $\Delta E_{DD}$  decrece ( $\Delta E_{DD} < 0$ ) con el incremento del espesor de la película, ya que las interacciones entre diferentes capas siempre da contribuciones negativas a  $\Delta E_{DD}$ . Por lo tanto para espesores grandes de las películas de Co la dirección de la magnetización estará en el plano. Para los sistemas considerados, cálculos preliminares muestran que las contribuciones DD a la EAM no cambian cualitativamente nuestros resultados ya que  $\Delta E_{DD} \sim -0.05$  meV.

## 3.2 Densidad de Estados

Las densidades de estado autoconsistentes para las diferentes monocapas y diferentes direcciones de magnetización son mostradas en las Figuras 3.2.1-3.2.3. La capa 1 corresponde a átomos de la superficie (Co) y las capas 2 a la 5 corresponden a átomos del interior (Pd). Nótese que en la capa 1 la banda de espín mayoritario (up) esta saturada. Esto trae como consecuencia que el valor del momento magnético esté saturado ( $\langle 2S_x \rangle \simeq 1.67$ ). Esto significa que las interacciones down-down son las más importantes a la contribución de la energía de anisotropía magnética. Por el contrario, en el caso de Pd las bandas se encuentran no saturadas lo cual trae como consecuencia que la contribución a la energía de anisotropía magnética provenga de las interacciones up-up, down-down y up-down. De aquí la importancia de realizar cálculos autoconsistentes de la estructura electrónica. Debido a la polarización de espín existe en la capa 2 un corrimiento entre las bandas up y down (ver Fig. 1). Es muy difícil apreciar los cambios de la DOS para las distintas direcciones de magnetización. Con el fin de estudiar qué tipo de interacciones podrían contribuir más a la energía de anisotropía magnética, se dan los resultados en las Figs. 3.2.4 a la 3.2.6. Se puede observar que como se esperaba los cambios más apreciables cerca de la energía de Fermi se encuentran en la primer capa. Siendo estos cambios más notorios en, como se discutió anteriormente, la proyección down de la densidad de estados. Nótese que el cambio entre las distintas bases de la dirección X, son notables. Sin embargo, la energía calculada en ambas bases es la misma. Esto es debido al caracter de muchos cuerpos de la interacción espín-órbita. En las subsiguientes capas (Pd) los cambios no son tan notables, pero debido a la polarización de espín, estos también contribuyen a la EAM.



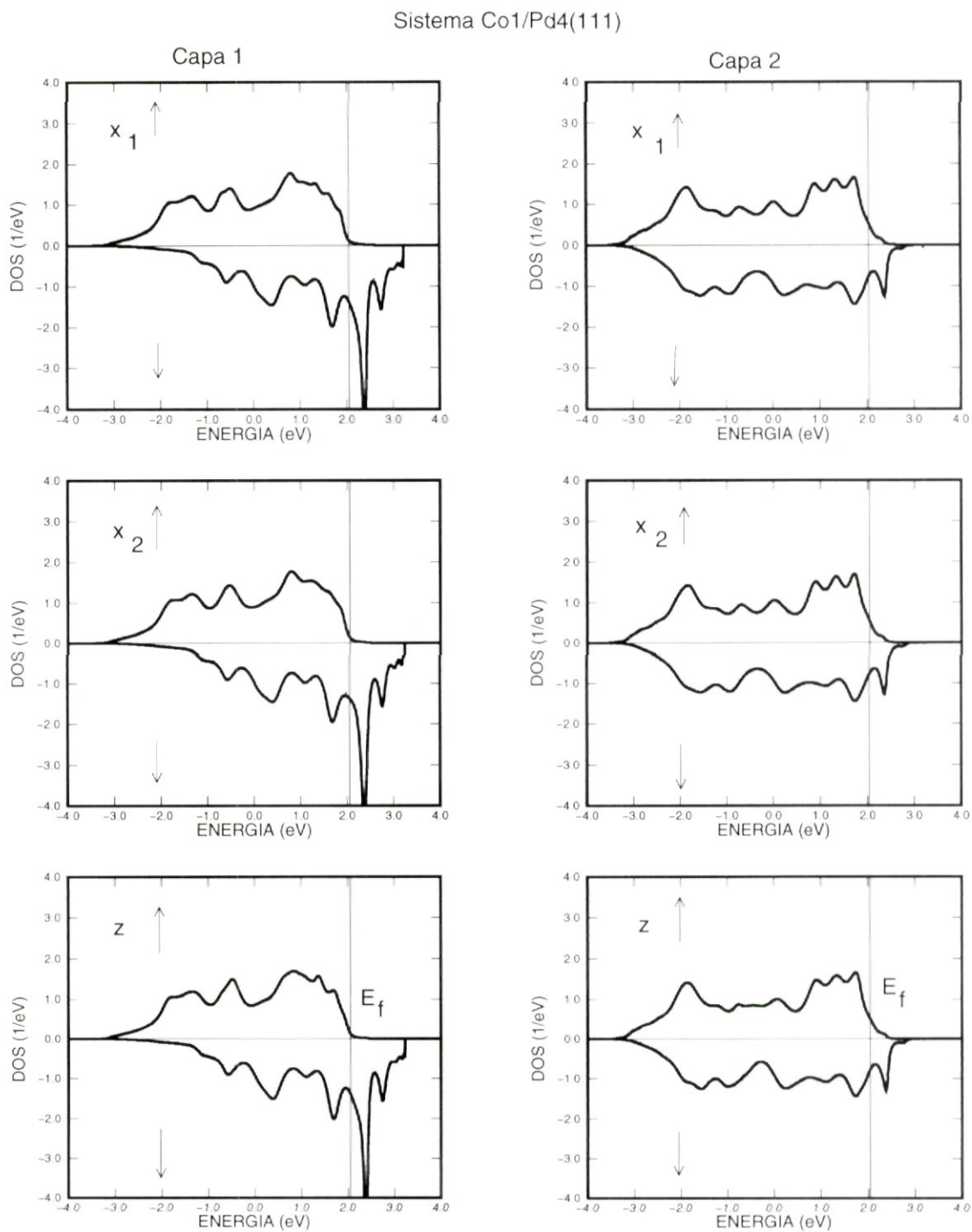


Figura 3.2.1

Densidades de estados electrónicos Vs la Energía.

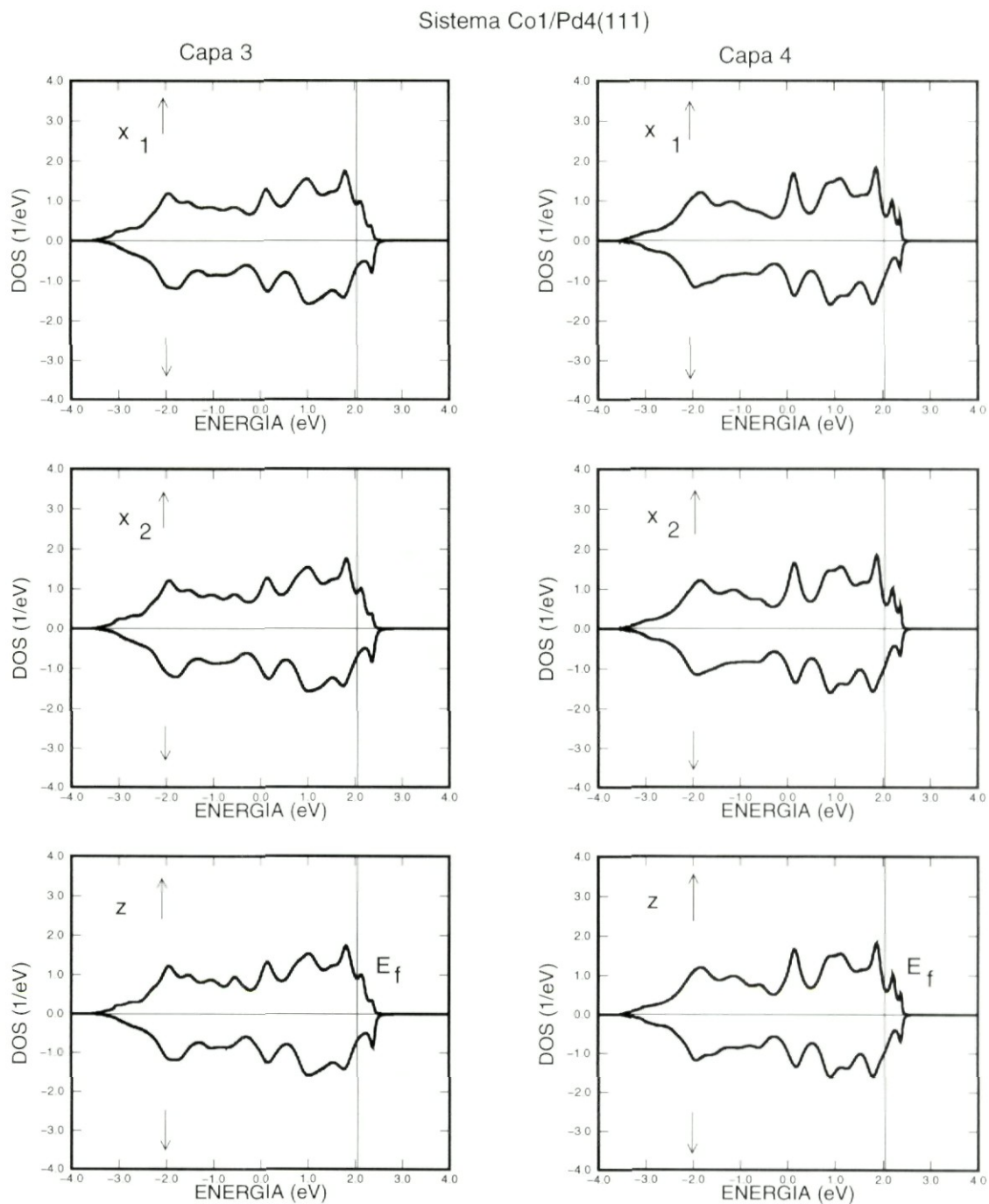


Figura 3.2.2

Densidades de estados electrónicos Vs la Energía .

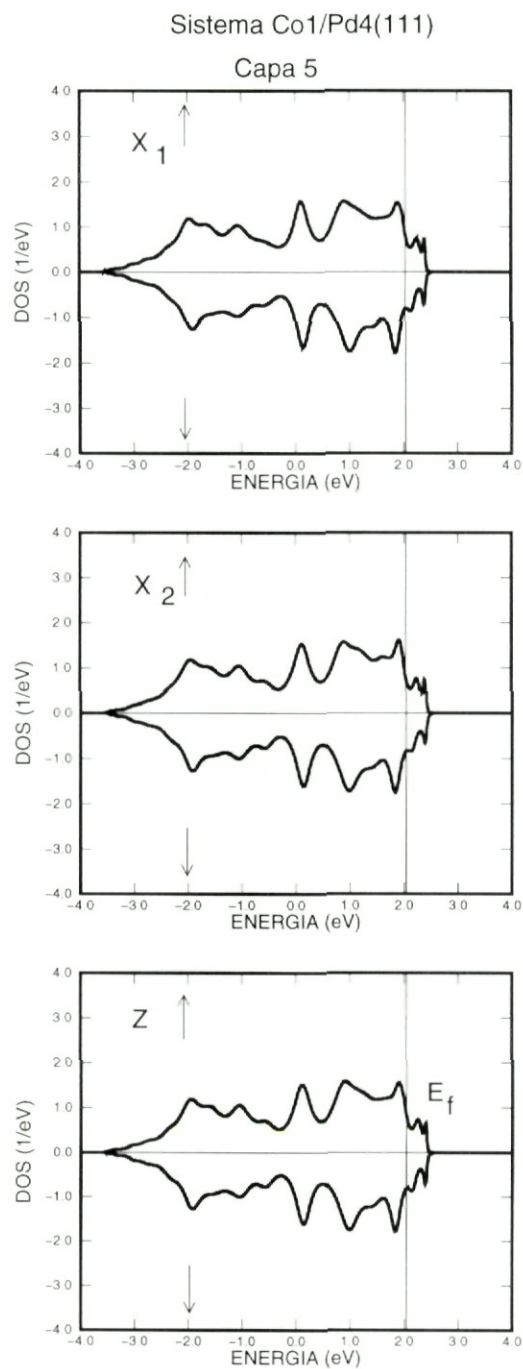


Figura 3.2.3

Densidades de estados electrónicos Vs la Energía.

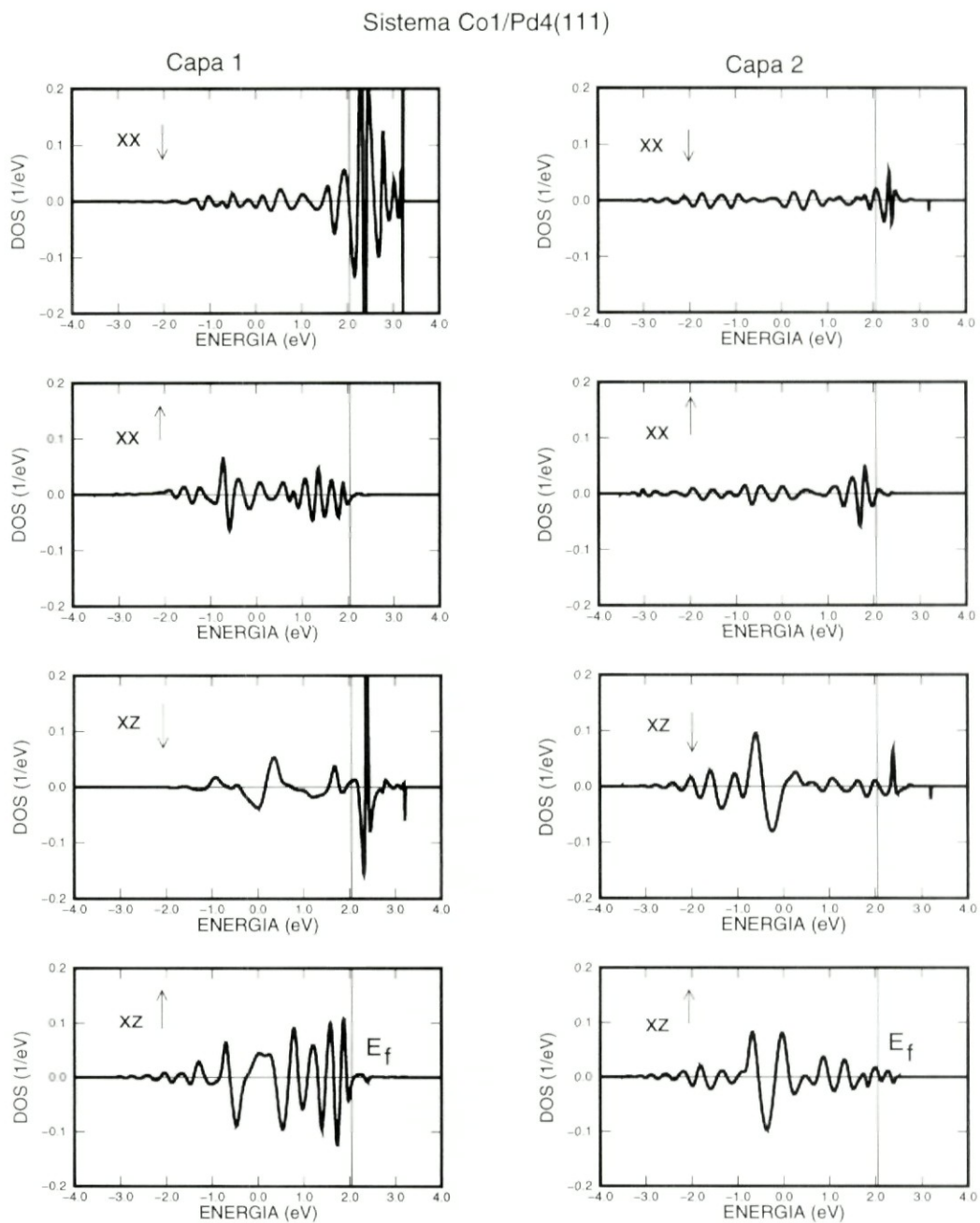


Figura 3.2.4

Diferencias de las densidades de estados electrónicos Vs la Energía .

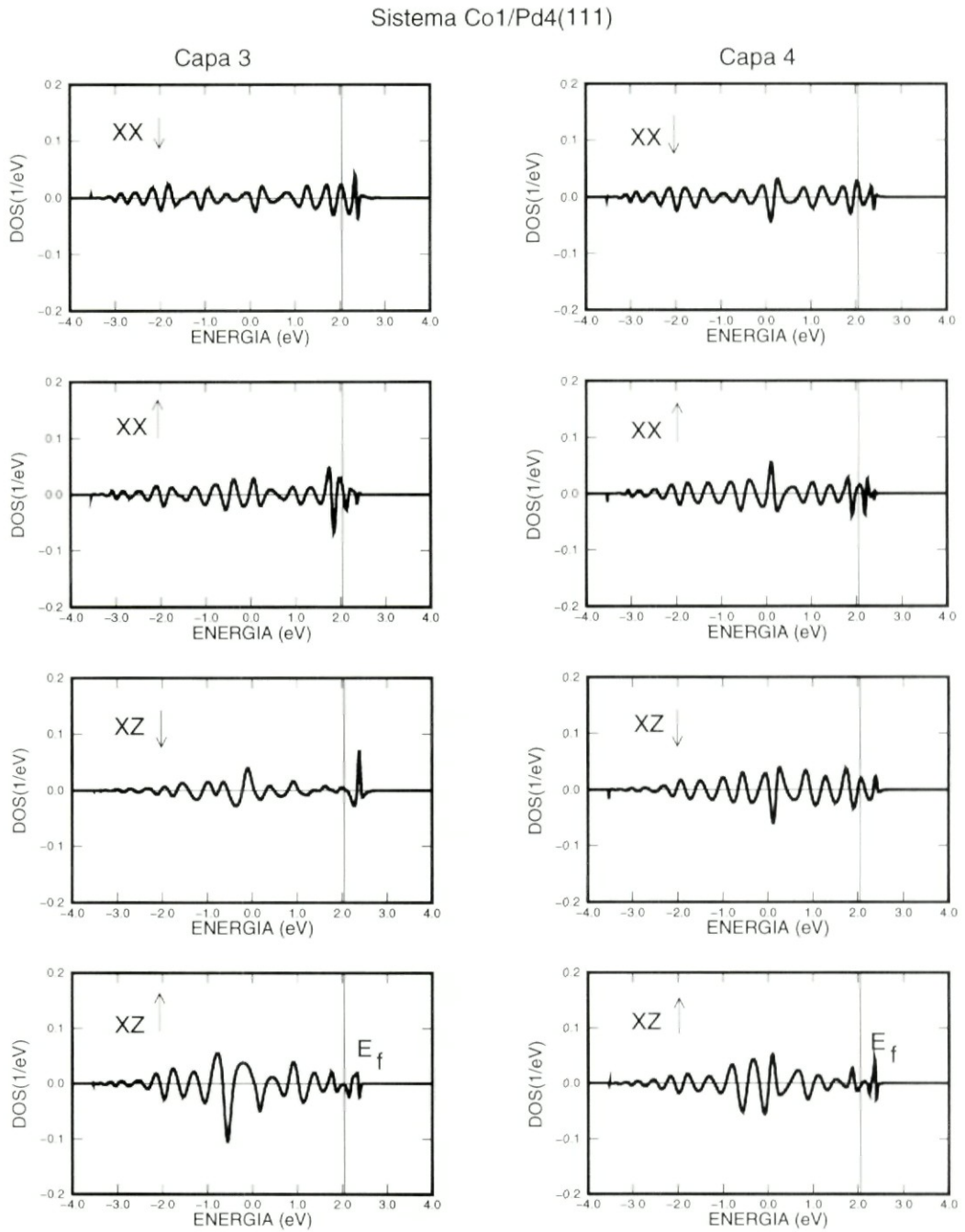


Figura 3.2.5

Diferencias de las densidades de estados electrónicos Vs la Energía.

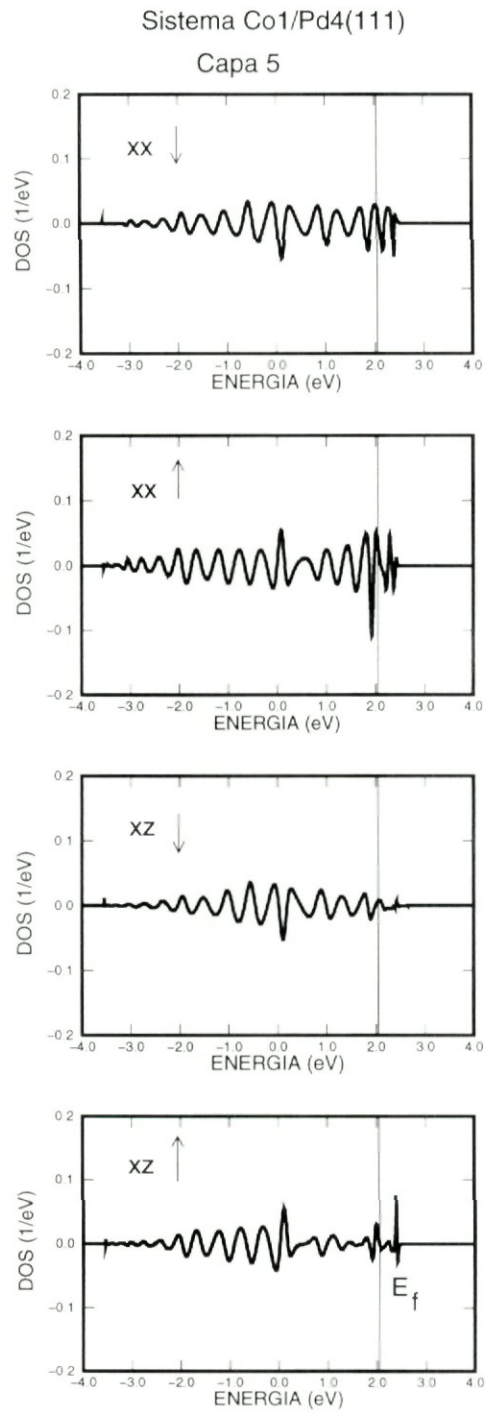


Figura 3.2.6

Diferencias de las densidades de estados electrónicos Vs la Energía.

# Capítulo 4

## Conclusiones y Perspectivas

Se calcularon las propiedades magnéto-anisotrópicas de películas delgadas de  $\text{Pd}_m/\text{Co}_n/\text{Pd}(111)$  utilizando un Hamiltoniano de amarre fuerte tipo Hubbard. Las interacciones de salto, de Coulomb y de espín-órbita fueron consideradas al mismo nivel electrónico. Usando parámetros realistas correspondientes a Co y Pd, la estructura electrónica y las propiedades magnéticas fueron determinadas autoconsistentemente. En contraste con monocapas suspendidas de  $\text{Co}_n$ , para los sistemas  $\text{Co}_n/\text{Pd}(111)$  ( $n \leq 4$ ) se observa que la energía de anisotropía magnética es pequeña y la dirección de la magnetización se encuentra dentro del plano. Sin embargo, al agregarle una o más monocapas de Pd, i.e. al considerar el sistema  $\text{Pd}_m/\text{Co}_4/\text{Pd}(111)$  ( $m \geq 1$ ), y suponiendo relajación de la distancia inter-atómica de la interfase Co-Pd la dirección de la magnetización es perpendicular de acuerdo a los resultados experimentales. Los momentos magnéticos de Co inducen una polarización de espín en las monocapas de Paladio cercanas a la interfase. Se estudió el efecto de la interacción espín-órbita del Pd calculando la estructura electrónica con y sin AEO. Cuando se considera que la AEO en Paladio es igual a cero, un cambio importante en los momentos orbitales correspondientes a la monocapa de Pd en la interfase es encontrado.

Algunos pasos adicionales serían necesarios con el propósito de realizar una descripción más cuantitativa de la energía de anisotropía magnética. Como ha sido discutido anteriormente, la anisotropía magnética de monocapas de Co parece ser muy sensible al substrato. Por lo tanto, un estudio teórico mas cuantitativo debería incluir implícitamente los efectos de hibridización de los electrones  $sp$  y  $sp-d$ , no obstante que las propiedades magnéticas y

la EAM son fuertemente dominadas por las contribuciones de los electrones  $d$ . Además, efectos estructurales tales como esfuerzos inducidos, distorsiones y la interdifusión de los átomos del sustrato deberían tener también una influencia sobre las propiedades magneto-anisotrópicas.



# Apéndice A

## Método de Recursión de Haydock

En el límite de interacciones débiles entre electrones y átomos, por ejemplo en un metal simple, la estructura electrónica se determina por la periodicidad de largo alcance de los potenciales atómicos. La teoría de bandas explota este aspecto de la física para expresar las propiedades electrónicas del sólido como una superposición coherente de las propiedades electrónicas de todos los átomos. Cuando los electrones interactúan fuertemente con los átomos, esta representación se viene abajo y las propiedades no dependen mucho de la periodicidad de largo alcance. Los electrones  $d$  en los metales de transición son ejemplos claros de este régimen, mientras la teoría de bandas es todavía válida de la solución formal de la ecuación de Schrödinger, pero la física es mejor entendida por medio de la solución que explícitamente toma en consideración el entorno local de los átomos. Esto es precisamente el método de recursión.

Los orbitales atómicos son localizados cerca de cada átomo. Las propiedades atómicas o de enlace que son independientes del entorno local determinan la base local de orbitales y sus interacciones expresadas por el modelo de amarre fuerte, que especifica la manera en la cual los electrones se acoplan a través del sólido para producir sus propiedades.

Físicamente la Densidad Local de Estados (DLE) es la intensidad de cada eigenestado sobre un átomo en particular o enlace. Matemáticamente es la magnitud de la proyección de cada eigenestado sobre un orbital local, de tal manera que DLE proporciona el acoplamiento de un orbital para eigenestados en cada energía.

El problema básico es encontrar la DLE para modelos de amarre fuerte o de orbitales localizados. La solución debe definir una jerarquía de entorno local tal que su influencia relativa es explícitamente desplegada en la DLE.

Una manera de atacar este problema se obtiene a partir de la combinación lineal de orbitales atómicos locales tales que el electrón debe pasar a través de cada estado como si

éste se difundiera en todos los orbitales atómicos locales.

Los cálculos de la estructura electrónica son llevados a cabo por medio del método de recursión. Este método tiene la ventaja de que funciona bastante bien para sistema en los cuales se ven inmersos en entornos locales diferentes.

Dado 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. La convergencia de la fracción continua se puede controlar para saber de la confiabilidad de los resultados.

Para calcular la función de Green utilizaremos el método de recursión de Haydock [38] 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  $\rho_{i\alpha\sigma}$  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 continuas 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:

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

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:

$$\langle u_0 | (\epsilon - H)^{-1} | u_0 \rangle = \frac{1}{\epsilon - a_0 - \left( \frac{b_1^2}{D_2} \right)}. \quad (\text{A.13})$$

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  $\epsilon$ .

# Apéndice B

## Segunda Cuantización

### Operadores de creación y aniquilación

Supongamos que tenemos un conjunto ortonormal de funciones de onda (de un electrón) espín orbitales, de las cuales algunas son ocupadas por electrones y otras están vacantes.

Hay diferentes maneras en las que el sistema puede ser descrito. Damos un ejemplo de algunas representaciones que se pueden llevar a cabo.

(a) Todos los orbitales están vacantes, esto es generalmente llamado espacio vacío. Tal estado es designado por  $|0\rangle$  o  $\psi_o$  podría ser escrito de la siguiente manera:

$$\psi_o = |0\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (\text{B.1})$$

en el cual los subíndices en el vector de estado se refieren a los espín orbitales. Así,  $|0_1\rangle$  significa que  $\psi_1$  está vacante (cero electrones en ese sitio),  $0_2$  significa que  $\psi_2$  está vacante, etc.

(b)  $\psi_m$  está ocupado; todos los otros orbitales están vacantes. Aquí nosotros debemos escribir

$$\psi_m = |0_1, 0_2, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle = \psi_m(1), \quad (\text{B.2})$$

en cual  $1_m$  significa que  $\psi_m$  es ocupado por un electrón. En vista de la restricción del principio de exclusión de Pauli, el número máximo de electrones que pueden residir en  $\psi_m$  (o cualquier otro orbital) es justamente uno.

(c) Dos orbitales  $\psi_l$  y  $\psi_m$ , donde cada uno contiene un electrón; todos los otros orbitales están vacantes. En la representación del vector de estado sería

$$\psi_{lm} = |0_1, 0_2, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (\text{B.3})$$

pero  $\psi_{lm}$  es una función de onda de dos electrones la cual debe ser antisimétrica con respecto a un intercambio de dos electrones. Esto es por lo tanto representado como un determinante de Slater

$$\psi_{lm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_l(1) & \psi_m(1) \\ \psi_l(2) & \psi_m(2) \end{vmatrix}, \quad (\text{B.4})$$

con  $\psi_{ml} = -\psi_{lm}$ . Por lo tanto

$$|0_1, 0_2, \dots, 1_m, \dots, 1_l, \dots, 0_N\rangle = -|0_1, 0_2, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle,$$

tres orbitales  $\psi_k, \psi_l, \psi_m$  son ocupados y el resto está vacante. Entonces

$$\psi_{klm} = |0_1, 0_2, \dots, 1_k, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle; \quad (\text{B.5})$$

el determinante de Slater correspondiente es

$$\psi_{klm} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_k(1) & \psi_l(1) & \psi_m(1) \\ \psi_k(2) & \psi_l(2) & \psi_m(2) \\ \psi_k(3) & \psi_l(3) & \psi_m(3) \end{vmatrix}; \quad (\text{B.6})$$

esto es suficiente para ilustrar la idea general. La descripción en términos de vectores de estados, es la dada a través del número de ocupación o descripción en el espacio de Fock; ésta enlista todos los orbitales y nos dice cuáles están ocupados y cuáles están vacantes. Un determinante de Slater enlista únicamente los orbitales ocupados. Un vector de estado o número de ocupación de la función de onda para un sistema de electrones puede ser escrito por

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$$

con  $n_k = 0, 1$ . Con el propósito de que los vectores de estado puedan ser uno a uno correspondientes con el determinante de Slater, es necesario arreglar los orbitales en cierto orden y entonces emplear el mismo orden en el correspondiente determinante de Slater ya que de la ortonormalidad se sigue que

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_k, |n_1, n_2, \dots, n_k\rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_k n_k}. \quad (\text{B.7})$$

Un operador de aniquilación es definido  $C_k$  como un operador que remueve un electrón en el  $k$ -ésimo orbital, suponiendo que dicho orbital inicialmente contiene un electrón. Así,

$$C_k |0_1, 0_2, \dots, 1_k, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 0_k, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (\text{B.8})$$

$$C_k \psi_{klm} = \psi_{lm}, \quad (\text{B.9})$$

donde  $\psi_{klm}$  y  $\psi_{lm}$  son entendidos ser vectores de estado. Estos son también consecuencia de la antisimetrización requerida de la función de onda.

$$C_l \psi_{klm} = -C_k \psi_{lkm} = -\psi_{km}. \quad (\text{B.10})$$

Si el operador de aniquilación opera sobre un orbital vacante, el resultado es cero; por ejemplo

$$C_i |0_1, 0_2, \dots, 0_i, \dots, 1_k, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle = C_i \psi_{klm} = 0. \quad (\text{B.11})$$

En particular, un operador de aniquilación actuando sobre el vacío es cero.

Dos operaciones sucesivas con los operadores de aniquilación son fácilmente interpretadas así

$$C_l C_k \psi_{klm} = C_l \psi_{lm} = \psi_m, \quad C_k C_l \psi_{klm} = -C_k \psi_{km} = -\psi_m.$$

Por lo tanto  $C_l, C_k$ , satisfacen

$$C_l C_k + C_k C_l = \{C_k, C_l\} = 0, \quad (\text{B.12})$$

donde  $\{C_k, C_l\}$  es conocido como anticomutador. Una consecuencia inmediata de (B.12) es que

$$C_k C_k = 0, \quad (\text{B.13})$$

lo cual simplemente nos dice que un electrón en el  $k$ -ésimo orbital no puede ser aniquilado más de una vez.

Habiendo definido el operador de aniquilación, debe ser posible definir un operador de creación  $C_k^\dagger$ , el cual crea una partícula en el  $k$ -ésimo orbital suponiendo que inicialmente éste se encontraba vacante. Así

$$C_k^\dagger \psi_o = \psi_m, \quad C_l^\dagger \psi_m = \psi_{lm}, \quad C_k^\dagger \psi_{lm} = \psi_{klm};$$

sin embargo, del principio exclusión de Pauli se tiene

$C_l^\dagger \psi_{lm} = 0$ . En la descripción del número de ocupación se tiene

$$C_m^\dagger |0_1, 0_2, \dots, 0, \dots\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (\text{B.14})$$

$$C_l^\dagger |0_1, 0_2, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 1l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (\text{B.15})$$

$$C_k^\dagger |0_1, 0_2, \dots, 1l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 1_k, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (\text{B.16})$$

o bien

$$C_k^\dagger C_l^\dagger C_m^\dagger |0_1, 0_2, \dots, 0, \dots\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 1_k, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (\text{B.17})$$

indicando que cualquier estado puede ser generado del estado vacío por un conjunto apropiado de operadores de creación. Pero

$$C_l^\dagger |0_1, 0_2, \dots, 1_l, \dots, 1_m, \dots, 0, \dots\rangle = 0, \quad (\text{B.18})$$

esto es, un operador actuando sobre un estado ocupado produce una función de onda que es idénticamente cero.

Si  $\psi_k, \psi_l$  son dos orbitales vacantes,

$$C_l^\dagger C_k^\dagger \psi_m = \psi_{lkm} = -\psi_{klm}, \quad (\text{B.19})$$

pero

$$C_k^\dagger C_l^\dagger \psi_m = \psi_{klm}, \quad (\text{B.20})$$

por lo tanto,

$$\{C_k^\dagger, C_l^\dagger\} = 0. \quad (\text{B.21})$$

Ahora bien, consideremos productos mezclados de  $C^\dagger$  y  $C$ . Un ejemplo sería

$$C_l^\dagger C_k \psi_k = \psi_l, \quad (\text{B.22})$$

$$C_k C_l^\dagger \psi_k = C_k \psi_{lk} = -\psi_l, \quad (\text{B.23})$$

tal que

$$\{C_k, C_l^\dagger\} = 0 (k \neq l). \quad (\text{B.24})$$

Cuando ( $l=k$ )tenemos

$$C_k^\dagger C_k \psi_o = 0, C_k C_k^\dagger \psi_o = \psi_o, \quad (\text{B.25})$$

$$C_k^\dagger C_k \psi_k = \psi_k, C_k C_k^\dagger \psi_k = 0. \quad (\text{B.26})$$

Se nota que los valores propios de  $C_k^\dagger C_k$  son (0 o 1) en el  $k$ -ésimo orbital. Entonces uno puede definir un operador de número para el  $k$ -ésimo orbital  $N_k$  donde

$$N_k = C_k^\dagger C_k = N_k^\dagger, \quad (\text{B.27})$$

lo cual implica que  $N_k^2 = N_k$ . De las expresiones (B.25),(B.26) se tiene que

$$(C_k C_k^\dagger + C_k^\dagger C_k) \psi_o = \psi_o, (C_k C_k^\dagger + C_k^\dagger C_k) \psi_k = \psi_k. \quad (\text{B.28})$$



En resumen, los operadores fermiónicos obedecen las reglas de conmutación

$$\{C_k^\dagger, C_l^\dagger\} = 0, \{C_k, C_l\} = 0, \{C_k, C_l^\dagger\} = \delta_{kl} \quad (\text{B.29})$$

### Operadores de Campo

Para los operadores fermiónicos definimos los operadores de campo  $\psi(r), \psi^\dagger(r')$  como

$$\psi(r) = \sum_k \phi_k(r) C_k, \quad (\text{B.30})$$

$$\psi^\dagger(r') = \sum_k \phi_k^*(r') C_k^\dagger, \quad (\text{B.31})$$

en donde  $\phi_k$  es un conjunto completo ortonormal de funciones de onda. Las reglas de conmutación pertinentes para  $\psi(r), \psi^\dagger(r')$  son directamente derivables de las reglas para  $C_k^\dagger, C_k$ . Así,

$$\{\psi(r), \psi(r')\} = \sum_{kl} \{C_k, C_l\} \phi_k(r) \phi_l(r') = 0, \quad (\text{B.32})$$

$$\{\psi^\dagger(r), \psi^\dagger(r')\} = \sum_{kl} \{C_k^\dagger, C_l^\dagger\} \phi_k^*(r) \phi_l^*(r') = 0, \quad (\text{B.33})$$

$$\{\psi(r), \psi^\dagger(r')\} = \sum_{kl} \{C_k, C_l^\dagger\} \phi_k(r) \phi_l^*(r') = \sum_k \phi_k(r) \phi_k^*(r') = \delta(r - r'). \quad (\text{B.34})$$

La función delta en (B.34) es un resultado de la propiedad de cerradura del conjunto ortonormal  $\phi_k$ . La suma de los operadores de una partícula y dos partículas pueden ser expresados en términos de un operador de campo. Sea  $f$  el operador de una partícula, entonces

$$\int \psi^\dagger(r) f \psi(r) dr = \sum_{kl} C_k^\dagger C_l \int \phi_k^*(r) f \phi_l(r) dr = \sum_{kl} \langle \phi_k(r) | f | \phi_l(r) \rangle C_k^\dagger C_l. \quad (\text{B.35})$$

La suma del operador de dos partículas toma la forma

$$G = \frac{1}{2} \int \psi^\dagger(r_1) \psi^\dagger(r_2) g_{12} \psi(r_2) \psi(r_1) dr_1 dr_2, \quad (\text{B.36})$$

$$G = \frac{1}{2} \sum_{kl, mn} C_k^\dagger C_l^\dagger C_n C_m \int \phi_k^*(r_1) \phi_l^*(r_2) g_{12} \phi_n(r_2) \phi_m(r_1) dr_1 dr_2, \quad (\text{B.37})$$

$$G = \frac{1}{2} \sum_{kl, mn} C_k^\dagger C_l^\dagger C_n C_m \langle kl | g_{12} | mn \rangle. \quad (\text{B.38})$$

Como ejemplo, el operador de energía cinética para un número arbitrario de electrones puede ser escrito como

$$T = \frac{1}{2m} \sum_{kl} \langle k | p^2 | l \rangle C_k^\dagger C_l, \quad (\text{B.39})$$

$$= \frac{1}{2m} \int \psi^\dagger(r) p^2 \psi(r) dr. \quad (\text{B.40})$$

La energía de repulsión coulóbica queda como

$$G = \frac{1}{2} \sum_{kl,mn} \langle kl | \frac{e^2}{r_{12}} | mn \rangle C_k^\dagger C_l^\dagger C_n C_m. \quad (\text{B.41})$$

# Apéndice C

## Anisotropía proveniente de las interacciones dipolo-dipolo

En el presente apéndice nuestro objetivo es discutir a nivel microscópico la anisotropía magnética debido a la interacción dipolo-dipolo. En un ferromagnetismo itinerante como el de Fe, Co o Ni, el momento magnético no es localizado, de tal manera que uno tiene que considerar la densidad local de magnetización  $\hat{m}(r)$  (no confundir con la densidad de magnetización macroscópica  $M(r)$ , la cual es promediada sobre un gran número de celdas). La interacción dipolo-dipolo ha sido discutida por Jansen [39] desde el punto de vista de la teoría relativista de la funcional de la densidad, la cual es apropiado punto de inicio para este problema. La expresión del Hamiltoniano para la interacción dipolo-dipolo puede ser escrita de la siguiente manera

$$H_{dip} = \frac{\mu_B^2}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \times (\hat{m}(\vec{r}) \cdot \hat{m}(\vec{r}') - 3 \frac{[(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \hat{m}(\vec{r})][(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \hat{m}(\vec{r}')] }{|\vec{r} - \vec{r}'|^2}), \quad (C.1)$$

donde  $\hat{m}(\vec{r})$  es el operador de densidad de magnetización, expresado en unidades de  $\mu_B$  por unidad de volumen. Este resultado es claramente interpretado como la interacción entre la magnetización y el campo dipolar creado por la magnetización del ferromagneto entero. Este es un Hamiltoniano de muchos cuerpos, el cual por simplicidad puede ser tratado en la aproximación de Hartree-Fock, tal que la energía dipolar magnética  $E_{dip}$  es obtenida reemplazando en  $H_{dip}$  el operador  $\hat{m}(\vec{r})$  por su valor de expectación  $m(\vec{r})$ . Esa interacción dipolo-dipolo es claramente una corrección relativista al Hamiltoniano, ya que es proporcional  $\mu_B^2 \approx c^{-2}$ . Si la distribución de magnetización entre cada celda atómica es no esférica, entonces su expansión en multipolos incluye no únicamente un momento dipolar, también multipolos de más alto orden como cuadrupolos, octopolos, etc. Sin embargo, en

los metales de transición  $3d$ , la distribución de la magnetización es casi esférica y puede ser remplazada por momentos magnéticos dipolares  $m_i$  (donde  $m_i = \mu_i + L_i$ ,  $i$  es el índice atómico), tal que la energía dipolar se escribe

$$E_{dip} = \frac{\mu_B^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}^3} (m_i \cdot m_j - 3 \frac{(r_{ij} \cdot m_i)(r_{ij} \cdot m_j)}{r_{ij}^2}). \quad (C.2)$$

Recordando que todos los momentos son paralelos, como consecuencia de la interacción de intercambio dominante,  $E_{dip}$  puede ser escrita como

$$E_{dip} = \frac{\mu_B^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}^3} m_i m_j (1 - 3 \cos^2 \theta_{ij}), \quad (C.3)$$

donde  $\theta_{ij}$  es el ángulo entre la dirección de magnetización  $\Omega_M$  y la dirección  $u_{ij}$  del par  $(i, j)$ . La Ec.(1.3) muestra que la interacción dipolo-dipolo contribuye a la anisotropía.

# Bibliografía

- [1] **Ultrathin Magnetic Structures I**: an Introduction to Electronic, Magnetic , and Structural Properties, J. A. C. Bland and B.Heinrich , Eds., Springer Verlag, 1994, En esta referencia clasifican los resultados en aquellos obtenido con y sin la aproximación escalar relativista.
- [2] Falicov *et al.*, *J. Mater. Res.*, **5** , 1299, (1990).
- [3] P. F. Carcia, *J. Appl. Phys.*, **63**(10), 5066-5073 (1988)
- [4] A. J Freeman y R. Q. Wu, *J. Magn. Magn. Mater* **100**, 497, (1991).
- [5] Ch. Li, A.J. Freeman, H. J. F. Jansen, y C. L. Fu, *phys.Rev* , **42**, 5433, (1990).
- [6] P. Bruno, *Phys.Rev.B*, **39**, 865, (1989).
- [7] G. H. O. Daalderop, P.J.Kelly, y M.F.H.Schuurmans, *Phys. Rev. B*, **42**, 7270 (1990).
- [8] G. H. O. Daalderop, P. J. Kelly, y F. J. A. Den Broeder *Phys. Rev. Lett.* **68**, 682 (1992).
- [9] S. T. Purcell , M. T. Johnson, N. W. E. McGee, W. B. Zeper y W. Hoving, *J. Magn. Mater. Mater.* ,**113** , 257, (1992).
- [10] Brad N. Engel, Michael H. Wiedmann, Robert A. Van Leeuwen and Charles M. Falco, *J. Magn. Magn. Mater.*, **126**, 532, (1993).
- [11] J. Kohlhepp, U. Gradmann. *J. Magn. Magn. Mater.* **139**, 347, (1995).
- [12] U. Gradman, *J. Magn. Magn. Mater.* **100**, 481, (1991).
- [13] R. M. White, **Quantum Theory of Magnetism** (Secunda edición), Springer series in Solid State Sciences vol. 32, (1983).
- [14] J. H. Van Vleck ,*Phys. Rev.*, **52**, 1178, (1937).

- [15] L. Néel, *J. Phys. Radium* **15**, 225, (1954).
- [16] Harvey Brooks, *Phys. Rev.* **58**, 909, (1940).
- [17] Abate. *Phys. Rev.*, **140**, A1303, (1965).
- [18] Bennet *et al.*, *Phys. Rev. B.*, **3**, 1642, (1971).
- [19] Takyama *et al.*, *Phys. Rev. B*, **14**, 2287, (1976).
- [20] C. Chappert y P. Bruno, *J. Appl. Phys.*, **64**, 5736, (1988).
- [21] J. G. Gay y Ritcher *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 2728, (1986).
- [22] R Lorenz y J Hafner, *Journal. Phys. Cond. Matter*, **7**, 253, (1995).
- [23] Ding-Sheng Wang, Ruqian Wu y A. J. Freeman, *Phys. Rev. Lett.*, **70**. 869, (1993).
- [24] Peter Weinberger, *Phys. Rev. B*, **51**, 9552, (1995).
- [25] Š. Pick and H. Dreyseé, *Phys. Rev. B* **48**, 13588 (1993).
- [26] G. M. Pastor, J. Dorantes-Dávila and K. H. Bennemann, *Phys. Rev. B* **40**, 7642 (1989).
- [27] Š. Pick, J. Dorantes-Dávila, G. M. Pastor and H. Dreyseé, *Phys. Rev. B* **50**, 993 (1994).
- [28] G. M. Pastor, J. Dorantes-Dávila, Š. Pick and H. Dreyseé, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 326 (1995)
- [29] B. D. Cullity, **Introduction to Magnetic Materials**, Addison-Wesley Series in Metallurgy and Materials, (1972).
- [30] C. Kittel, **Introduction to Solid State Physics**, 5th Edition.
- [31] P. Bruno, *Magnetismus Von Festkörpern und Grenzflächen*, Ferien kurse des Forschungszentrums Julich (KFA julich,1993),ISBN 3-89336-110-3,Ch. 24
- [32] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, **Quantum Mechanics** Vol.3 Course in Theoretical Physics, tercera edición, Pergamon Press (1991).
- [33] Hal Tasaki *cond. Matter*, 9512169 **Vol.3** 4 march 1996. (*reprint*)
- [34] Series on Advances in Statistical Mechanics-Vol.7. **The Hubbard Model Recent Results**. Editor

- [35] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
- [36] W. A. Harrison, **Electronic Structure of Solids and the Properties of Solids** *The Physics of the Chemical Bond*, ed. Dover (1980).
- [37] N. E. Chritensen, O. Gunnarsson, O. Jepsen y O. K. Andersen, *J.phys*, (Paris)**49** C8-17 (1988).
- [38] **Solid State Physics** vol. 35 Editado por H. Ehrenre F. Seitz y D. Turnbull, Academic Press (1980).
- [39] H. J. F. Jansen, *Phys Rev. B*, **38**, 8022, (1988).