



Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE CIENCIAS
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

RESPUESTA OPTICA Y MAGNETICA
DE SISTEMAS CON INTERFACES

T E S I S

Que para obtener el Grado Académico de
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

p r e s e n t a

JESUS MARIA TARRIBA UNGER

DIRECTORES DE TESIS:

DR. WOLF LUIS MOCHAN BACKAL

DR. DOUGLAS L. MILLS

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

1993



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Contenido

I	Introducción General.	3
II	Introducción. Parte I	7
	a Contexto General.	7
	b Respuesta Dieléctrica en Superficies Metálicas.	8
	c Anisotropías en la Respuesta Superficial de cristales de plata.	10
III	Formalismo Perturbativo y Modelo.	13
	a Formalismo Perturbativo.	15
	b Consideraciones Generales del Problema.	17
	c Modelo de Metal Incluyendo Estructura Cristalina.	19
IV	Experimentos de EELS.	25
	a Teoría Semi-clásica de EELS.	27
V	Resultados y Discusión.	32
	a Propiedades dieléctricas en el interior de la plata.	32
	b Conductividad Superficial de la plata.	33
	c Señal de EELS.	35
	d Cálculo de la Reflectancia Superficial.	38
VI	Conclusiones. Parte I.	40
VII	Introducción. Parte II.	46
	a Superredes Magnéticas.	47

b	Superredes de Metales de Transición.	47
c	Superredes con tierras raras.	49
d	Modelos Unidimensionales.	51
e	Superred Magnética Modelo.	54
VIII Teoría del Campo Medio de Ondas de Densidad de Espín. Caso ho-		
	mogéneo.	58
a	$T > T_c$	59
b	$T < T_c$	63
IX	Superred Modelo.	71
a	Ecuaciones Autoconsistentes.	72
b	Susceptibilidad Magnética.	77
c	Representaciones de la Susceptibilidad.	80
X	Resultados y Discusión.	84
a	Parámetros y Cálculo Numérico.	84
b	Resultados.	87
XI	Ondas de espín Helicoidales.	95
XII	Conclusiones. Parte II.	101
XIII	Conclusiones Generales.	103

I Introducción General.

El presente trabajo de tesis doctoral se inserta dentro de los esfuerzos por entender los mecanismos subyacentes que determinan la respuesta electrónica de metales cristalinos cerca de una interfaz, o un arreglo periódico de interfaces, como contraparte a la respuesta en el interior de metales cristalinos semi-infinitos. Dentro de un contexto más general, el trabajo representa una contribución al estudio de los efectos de la correlación electrónica introducida por el rompimiento de simetría traslacional en una de las direcciones del cristal.

En la primera parte del trabajo se desarrolla un modelo que nos permite evaluar el efecto de la presencia de la superficie sobre las propiedades ópticas de metales cristalinos, debido al cambio en el campo electromagnético que polariza las moléculas de los primeros planos cristalinos. El formalismo utilizado permite conectar las propiedades ópticas dentro del metal con el cambio en la respuesta cerca de la superficie, lo que hace posible utilizar el modelo para hacer predicciones experimentales.

En la segunda parte del trabajo se estudia la dependencia con la temperatura del estado base y respuesta magnética estática de una superred modelo. Nuestro interés primordial es investigar el efecto de la periodicidad de la superred sobre los estados electrónicos, como ello se refleja en la respuesta del sistema a campos magnéticos externos, y las posible configuraciones de espín que se pueden obtener al intercalar diversos materiales magnéticos. En ello partimos de un modelo microscópico lo suficientemente sencillo como para calcular explícitamente funciones de onda electrónicas y sus energías. El costo de hacerlo es que el modelo no resulta muy adecuado para hacer predicciones experimentales, aunque esto se compensa con la riqueza cualitativa a que da lugar.

En los dos sistemas estudiados juega un papel importante el rompimiento de la simetría traslacional en una de las direcciones, y el efecto que esto tiene sobre las propiedades electrónicas de sistemas cristalinos cuyas propiedades en el interior se conocen. En el caso de nuestro modelo de metal semi-infinito, el campo local que polariza los átomos del cristal cerca de la superficie puede tener variaciones significativas respecto al campo local muy dentro en el cristal. Ello se traduce en una contribución a la respuesta dieléctrica que entra como una corrección a la respuesta en el interior del material. En el caso de la superred magnética, la simetría del problema implica que los estados propios del sistema no sean simples ondas planas, sino una superposición apropiada de ondas planas con vectores de onda que difieren entre sí por vectores de la red recíproca de la superred.

Así mismo, en ambos casos juega un papel importante las singularidades en las funciones respuesta como forma de caracterizar el comportamiento colectivo de los electrones. En la superred magnética, la susceptibilidad de espín estática como función de la temperatura presenta comportamiento singular a las temperaturas críticas a las que se dan los cambios de fase magnética. En el caso del metal cristalino, los polos en el coeficiente de reflexión determinan la relación de dispersión de los plasmones de superficie, que a su vez es afectada significativamente por la existencia de resonancias en las conductividades superficiales.

Los dos modelos tratan de dar una alternativa original y físicamente intuitiva a problemas cuya solución a primeros principios no existe, o implica cálculos muy engorrosos debido a la complejidad introducida por la interacción electrónica. En las superredes magnéticas, la complejidad reside en la fuerte correlación electrónica que introduce la interacción de intercambio. En el cálculo de propiedades ópticas de metales, los problemas están asociados al largo alcance de la interacción coulombiana, que hace muy costoso evaluar los campos

autoconsistentes a primeros principios.

Por razones de claridad y consistencia, se decidió presentar cada parte con su introducción, desarrollo y figuras. En la primera parte se presenta nuestro metal modelo incluyendo efectos de la estructura cristalina, y en la segunda, la superred magnética modelo.

Finalizamos esta tesis con un resumen del trabajo realizado y conclusiones.

PARTE I

II Introducción. Parte I

a Contexto General.

Los esfuerzos por entender las propiedades físicas de superficies de materiales cristalinos han motivado una enorme cantidad de trabajo de investigación teórico y experimental [1]. En una buena parte de los experimentos realizados para estudiar superficies se tienen partículas de prueba (electrones o fotones, por ejemplo) que se hacen incidir sobre la superficie del material a estudiar con cierta energía y momento definido. La partícula puede entonces ser absorbida por el cristal, o ser reflejada perdiendo parte o nada de su momento y/o energía. En el proceso de dispersión se pueden, por ejemplo, excitar modos colectivos en el volumen del cristal, o en su superficie, o inducirse transiciones electrón-hoyo. Se pueden dar también procesos de dispersión múltiple e interferencia cuántica entre los rayos incidentes y reflejados. Para cada valor de la energía y momento de la partícula incidente, las amplitudes de probabilidad de que se den las diferentes posibilidades arriba mencionadas dependen del detalle de las interacciones que se establecen entre la partícula y el cristal.

Poder obtener información acerca de la estructura electrónica y las excitaciones elementales de los materiales a partir de sus espectros de dispersión de partículas es uno de los objetivos centrales de los esfuerzos teóricos y experimentales en la Física del Estado Sólido. En el contexto de la Física de Superficies, es muy importante poder distinguir los efectos que provienen del interior del material de aquellos que dependen de lo que sucede en las región superficial propiamente dicha. En el caso de monocristales con una superficie bien definida, la región superficial resulta ser para todos fin práctico de unos cuantos planos cristalinos a partir del primero, en el sentido de que la configuración atómica y estructura

electrónica alrededor de los sitios de la red tienden rápidamente a las correspondientes al interior conforme nos alejamos de la superficie hacia dentro del cristal. Ello no excluye, desde luego, que existan excitaciones colectivas localizadas en la superficie que se extienden cientos o miles de planos cristalinos en el interior del cristal, como es el caso de los plasmones de superficie discutidos mas adelante.

El presente trabajo se inserta dentro de los esfuerzos por entender los mecanismos subyacentes que determinan la respuesta de superficies metálicas a perturbaciones externas que se acoplan electromagnéticamente con los electrones del metal. En particular, estamos interesados en contribuciones de la región superficial a la respuesta dieléctrica relevantes a experimentos que, por medio de diversas técnicas espectroscópicas, son sensibles a la estructura detallada de la superficie de metales cristalinos. Como ejemplos de dichas espectroscopías sobresalen las que se conocen bajo el nombre genérico de Espectroscopía de Pérdida de Energía Electrónica (EELS) [2], y la vasta gama de espectroscopías ópticas de superficie, que incluye las técnicas de reflectancia diferencial [3], elipsometría diferencial [4], y la detección de plasmones de superficie por Reflexión Total Atenuada (ATR) [5].

b Respuesta Dieléctrica en Superficies Metálicas.

Buena parte de los tratamientos teóricos de la respuesta óptica superficial de metales se han basado en el llamado modelo de jalea [6], que básicamente consiste en considerar el metal como un gas de electrones libres moviéndose en un fondo positivo rígido. Aunque los cálculos con el modelo de jalea han alcanzado niveles de sofisticación notables, tienen el inconveniente de no incluir los efectos de la red de iones. Durante los últimos años se

ha dado un interés creciente por incluir efectos cristalinos en los cálculos de la respuesta óptica de metales. Aunque el formalismo para el cálculo *ab initio* se ha establecido [8], las dificultades numéricas para llevarlo a cabo en metales reales son formidables. Para tener una idea de la magnitud del problema, baste pensar que aun en el caso relativamente simple del modelo de jalea, el largo alcance de la interacción coulombiana introduce considerables dificultades numéricas al resolver autoconsistentemente el perfil de densidad electrónica. Actualmente sigue siendo necesario hacer aproximaciones significativas si se quiere contar con un modelo tratable [9].

Entre los metales cuyo estudio han despertado mayor interés en términos del efecto de la estructura cristalina sobre sus propiedades ópticas sobresalen los metales nobles Cu, Ag y Au. En contraste con los metales alcalinos, los cuales son razonablemente bien descritos por el modelo de jalea, las funciones dieléctricas de los metales nobles reflejan una combinación compleja de contribuciones de transiciones interbanda e intrabanda.

En el modelo de jalea la respuesta óptica en el interior del metal esta caracterizada por ω_p , la frecuencia del plasmón de volumen, modo normal de caracter colectivo cuyo origen es el largo alcance de la interacción coulombiana. Al ser un modo propio del sistema, el plasmón de volumen corresponde a una solución no trivial de las ecuaciones de Maxwell en ausencia de campo externo, y en ω_p la función dieléctrica del interior del metal se anula. En los metales alcalinos ω_p se encuentra por abajo del inicio de las transiciones interbandas, dada por la mínima energía de transición permitida por el principio de Pauli que conecta dos bandas diferentes. De ahí que en dichos metales la constante dieléctrica como función de la frecuencia muestra un comportamiento de 'jalea', al menos hasta $\omega = \omega_p$. En particular,

el plasmón de superficie se da en $\omega \simeq \omega_p/\sqrt{2}$, y $\epsilon(\omega_p) \simeq 0$.

La situación es muy diferente para el caso de los metales nobles. Considerese, por ejemplo, la plata. Para la plata, de la densidad promedio de sus electrones de conducción se obtiene $\omega_p \simeq 9eV$, pero las transiciones interbanda empiezan alrededor de $\omega \simeq 3.8eV$. En la plata, el plasmón de volumen se da alrededor de $3.9eV$, y el de superficie a $\omega_p \simeq 3.65eV$. En estos modos colectivos participan tanto los electrones de conducción como los de valencia, y no se pueden entender en término de una simple oscilación de plasma de una gas de electrones libres.

c Anisotropías en la Respuesta Superficial de cristales de plata.

En el presente trabajo se adapta y generaliza un modelo sencillo desarrollado con anterioridad [11] para tratar de entender experimentos recientes realizados sobre superficies de cristales de plata.

En la primera serie de ellos, diversos autores reportan [12] [13] [14] mediciones de la relación de dispersión del plasmón de superficie de mono-cristales con superficies orientadas de acuerdo a a las caras $Ag(001)$, $Ag(110)$, y $Ag(111)$. Las mediciones se realizaron con la técnica de HREELS, de la que hablaremos más adelante. Baste por ahora mencionar que con dicha técnica es posible encontrar la dependencia de la frecuencia del plasmón respecto al vector de onda Q que lo modula a lo largo de la dirección en la que se propaga en la superficie.

A grandes rasgos, los resultados relevantes que se reportaron fueron:

- Una dispersión con pendiente positiva para las caras $Ag(111)$ [12] y $Ag(001)$ [14].

Cálculos para el modelo de jalea predicen una pendiente negativa en una gráfica

ω_{sp} v.s. Q . El signo de la pendiente de la relación de dispersión del plasmón está íntimamente relacionado con las distribución espacial de la carga electrónica superficial respecto al fondo positivo rígido [7].

- Una dependencia notable de la relación de dispersión del plasmón de superficie con la cara cristalina y, en el caso de la cara Ag(110) [13], de la dirección relativa entre el vector de propagación del plasmón y las direcciones [001] y [1 $\bar{1}$ 0] de dicha cara. Esta última anisotropía se había ya detectado con anterioridad en el límite retardado [16] en un intervalo de frecuencias menores.

La segunda serie de experimentos reportan la dependencia de la reflectancia a incidencia normal de cristales Ag(110) con la orientación relativa entre el cristal y el vector de polarización del haz incidente [20]. Cabe aclarar que estos experimentos se realizaron motivados por las predicciones obtenidas con el modelo presentado en este trabajo. El modelo predice [18] una anisotropía en la reflectancia del orden de 10 por ciento alrededor de 3.8eV, porcentaje enorme si se tiene en cuenta que el efecto se origina en una región del orden de Armstrongs alrededor de la superficie, y que en los experimentos análogos realizados en semiconductores y otros metales el orden de magnitud de dicha anisotropía es de una parte en mil. La coincidencia entre nuestra predicción y los resultados experimentales es sorprendente dada la simplicidad del modelo usado. Los resultados sugieren que, en el intervalo de frecuencias en los que se observa tal anisotropía, se activan en la superficie de la plata modos resonantes novedosos, y cuyo origen sería el fuerte acoplamiento electromagnético entre las diferentes contribuciones a la polarización total inducida cerca de la superficie del metal, en la que participan de manera intrincada los electrones de conducción, los de

valencia, y los del carozo iónico.

En la sección II hacemos una breve revisión del modelo empleado y la forma de resolverlo. En la sección III se discute y se deriva una teoría sencilla que permite aplicar nuestro modelo a los experimentos de EELS. En la sección IV se presentan y discuten los resultados, y la última sección se dedica a las conclusiones.

III Formalismo Perturbativo y Modelo.

Considerese un medio semi-infinito sujeto a campos electromagnético externos cuya dependencia temporal se supone de la forma $\exp(-i\omega t)$. En el regimen lineal, la relación constitutiva que determina la respuesta dieléctrica del medio a los campos externos es de la forma general

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}; \omega) = \int d^3\mathbf{r}' \hat{\epsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}'; \omega), \quad (1)$$

donde \mathbf{D} es el vector desplazamiento, \mathbf{E} el campo eléctrico total, y la integración es sobre todo el espacio. El tensor $\hat{\epsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$ caracteriza la respuesta no local del sistema, *i.e.* el modo en que el valor del campo en un punto del material afecta la respuesta en otros puntos. El alcance de la no localidad es típicamente del orden de \AA , por lo que la respuesta a una onda electromagnética que se propaga en el interior del medio con longitud de onda en el óptico esta satisfactoriamente descrita por la relación

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}; \omega) = \hat{\epsilon}(\mathbf{r}; \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega), \quad (2)$$

donde definimos el tensor dieléctrico local

$$\hat{\epsilon}(\mathbf{r}; \omega) = \int d^3\mathbf{r}' \hat{\epsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega). \quad (3)$$

La relación (2) deja de ser válida cerca de la región superficial, donde los campos varían en distancias del orden de \AA . En primera aproximación, uno puede simplemente asumir que el tensor dieléctrico pasa discontinuamente de su valor en el interior a su valor en el vacío al cruzar la superficie. Entonces, las propiedades ópticas del material estarán caracterizadas por un tensor dieléctrico de la forma:

$$\hat{\epsilon}(\mathbf{r}) = \mathbf{I}\Theta(z) + \hat{\epsilon}(\omega)\Theta(-z), \quad (4)$$

con $\Theta(z)$ la función escalón de Heavyside, I el tensor identidad, y se supone que el material ocupa la región $z < 0$.

Una ecuación constitutiva de la forma (4) lleva, junto con la ecuaciones de Maxwell, a las formulas de Fresnel usuales para la reflectividad de un medio semi-infinito. Dichas formulas describen razonablemente bien experimentos ópticos que por su naturaleza sean poco sensibles al detalle de lo que sucede en la región superficial. Lo inadecuado de la Ec. (4) cerca de la superficie queda manifesto al observar que implica una discontinuidad en la componente z del campo eléctrico en $z = 0$, o equivalentemente, una densidad superficial de carga inducida singular. La superficie en este caso aparece sólo como una forma simple de 'pegar' las soluciones a las ecuaciones de Maxwell muy dentro en el material con las soluciones en el vacío.

Existen dos acercamientos complementarios al problema de describir de forma razonable el efecto de la superficie en las propiedades ópticas de un material. Por un lado, se tienen formalismos basados en modelos microscópicos lo suficientemente simples que permitan resolver autoconsistentemente los campos y densidades electrónicas cerca de la superficie. El modelo de 'jalea' mencionado en la introducción es por mucho el más recurrido. Su relativa simplicidad proviene de que se asume que el sistema es invariante ante traslaciones a lo largo de la superficie, por lo que es posible desacoplar la coordenada z pasando a una representación de Fourier bidimensional en las coordenadas (x, y) .

Por otro lado, se tienen diversos formalismos perturbativos, en los que se trata a la superficie como una perturbación que induce cambios en la densidad de corriente y polarización cerca de la superficie respecto a su valor en interior del material [19] [17] [21]. A continuación haremos una breve revisión del formalismo perturbativo y modelo usado en

los cálculos presentados en este trabajo. Los detalles se pueden encontrar en las referencias [17] y [11], por lo que aquí nos limitaremos a dar un esquema general poniendo énfasis en las cantidades físicas relevantes al cálculo.

a Formalismo Perturbativo.

Considerese un medio semi-infinito sobre el que incide una onda electromagnética desde el vacío, con longitud de onda $2\pi c/\omega \gg d_s$, donde d_s es del orden de la región alrededor de la superficie en la que las propiedades físicas del medio difieren de las de su interior. Tomamos el eje Z positivo en la dirección normal a la superficie hacia afuera, y el plano de incidencia en $X - Z$. El plano $z = 0$ se supone situado en algún punto cercano a la superficie. Las propiedades ópticas del sistema semi-infinito se pueden caracterizar mediante su impedancia superficial, definida como

$$Z_p = \frac{E_x(z=0)}{B_y(z=0)} \quad (5)$$

para polarización p , y como

$$Z_s = -\frac{E_y(z=0)}{B_x(z=0)} \quad (6)$$

para polarización s . La ventaja de trabajar con la impedancia superficial reside, entre otras cosas, a que está definida en términos de campos que varían lentamente en la región superficial, por lo que la posición precisa del plano imagen nominal $z = 0$ es irrelevante en la medida en que se maneje de manera consistente.

Una vez conocida la impedancia superficial del material, los coeficientes de reflexión para ambas polarizaciones se obtienen de la relación

$$r_{p(s)} = \frac{Z_{p(s)}^v - Z_{p(s)}}{Z_{p(s)}^v + Z_{p(s)}} \quad (7)$$

donde $Z_p^v = \cos(\theta_i)$ y $Z_s^v = 1/\cos(\theta_i)$ son las impedancias superficiales del vacío para polarización p y s respectivamente, con θ_i el ángulo de incidencia. En particular, para el caso en que se supone un medio isotrópico descrito por un tensor dieléctrico de la forma (4), las impedancias están dadas por

$$Z_p^o = \frac{\cos(\theta_i)}{\sqrt{\epsilon_o(\omega)}} \quad (8)$$

$$Z_s^o = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_o(\omega) \cos(\theta_i)}}, \quad (9)$$

con θ_t el ángulo de la onda transmitida, y en este caso la función dieléctrica $\epsilon_o(\omega)$ es un escalar, pues supusimos que el sistema es isotrópico en su interior. $\epsilon_o(\omega)$ define nuestro problema no perturbado.

A continuación consideramos el caso en que existe una perturbación localizada cerca de la superficie, que modifica la impedancia superficial de la misma respecto a las expresiones (8). Sin pérdida de generalidad, podemos considerar que el efecto de la perturbación consiste en inducir un cambio en la densidad de corriente Δj respecto a la densidad de corriente del sistema no perturbado. Debido a la lenta variación espacial de los campos externos, es razonable suponer que la modificación en las propiedades ópticas del sistema debido a la perturbación no depende de la forma detallada de Δj , sino sólo del cambio total en la corriente superficial

$$i = \int_{-\infty}^{\infty} dz \Delta j. \quad (10)$$

Caracterizamos entonces la contribución de la superficie a la respuesta dieléctrica mediante las conductividades superficiales σ_{xx}, σ_{yy} , y s_{zz} , definidas en términos de los campos de variación lenta evaluados en la superficie como

$$i_x = \sigma_{xx} E_x(z=0) \quad (11)$$

$$i_y = \sigma_{yy} E_y(z=0) \quad (12)$$

$$i_z = s_{zz} D_z(z=0). \quad (13)$$

Resolviendo el problema de una onda incidente sobre el sistema no perturbado en presencia de una placa sobre la que fluye la corriente i , se puede obtener el cambio en la impedancia superficial debido a la perturbación en términos de la impedancia superficial del sistema no perturbado y las conductividades superficiales arriba definidas. Las expresiones son

$$Z_p = \frac{Z_p^o + \frac{4\pi s}{c} Q^2 s_{zz}}{1 + \frac{4\pi}{c} Z_p^o \sigma_{xx}} \quad (14)$$

$$Z_s = \frac{Z_s^o}{1 + \frac{4\pi}{c} Z_s^o \sigma_{yy}}, \quad (15)$$

donde Q es la componente del vector de onda incidente paralela a la superficie.

Para calcular las conductividades superficiales (11)-(13) hay que tomar un modelo específico que permita calcular el cambio de la densidad de corriente en la región superficial, respecto a la densidad de corriente en el interior. Las expresiones (11)-(15) son una forma conveniente de separar inequívocamente las diferentes contribuciones a la respuesta dieléctrica del sistema, y son de carácter bastante general. De hecho, las conductividades superficiales arriba definidas se pueden relacionar directamente con los parámetros d que aparecen en acercamientos perturbativos alternativos [22].

b Consideraciones Generales del Problema.

En el interior de un cristal perfecto, el Teorema de Bloch asegura que los estados electrónicos se puedan describir por medio de funciones de Bloch moduladas por cierto vector de onda

\mathbf{k} en la primera zona de Brillouin de la red recíproca del cristal. En presencia de un campo externo con vector de onda \mathbf{K} se inducen transiciones entre los diferentes estados electrónicos, transiciones compatibles con el principio de Pauli y cualesquiera reglas de selección que imponga la simetría de problema. En particular, la periodicidad de la red determina que dichas transiciones son tales que los vectores de onda de los estados final e inicial difieren por múltiplos de vectores \mathbf{G} de la red recíproca, y el campo eléctrico microscópico total es a su vez una superposición de ondas planas con vectores de onda $\mathbf{K} + \mathbf{G}$. Lo que entendemos por campo macroscópico no es sino un promedio ponderado de todas estas contribuciones. Al promediar, las componentes del campo que fluctúan en distancias del orden de la celda unitaria desaparecen, quedando sólo el campo macroscópico de variación lenta.

La polarización total que en el interior del cristal adquiere una celda primitiva del cristal depende de:

- su polarizabilidad, que a su vez depende del detalle de la estructura electrónica del cristal y de la forma en que los estados electrónicos son perturbados por el campo eléctrico.
- del campo local, *i.e.* la suma del campo externo, más el campo producido por todas las demás celdas del cristal, más el campo producido por las cargas dentro de la propia celda. Debido a la simetría del cristal, el campo local de dos celdas diferentes difiere, a lo más, por un factor de fase, y su modulación sigue la del campo macroscópico total.

La situación cerca de la superficie es muy diferente. Por un lado, la estructura

electrónica misma se modifica debido a la pérdida de simetría. Aparecen estados de superficie, fenómenos de reconstrucción, etc. Por otro lado, el valor del campo local que polariza a cada celda unitaria puede variar drásticamente respecto al de las celdas adyacentes y del interior. Aun en el caso ideal en que la configuración electrónica en las celdas unitarias de los primeros planos cristalinos fuese idéntica a la del interior, el sólo efecto de campo local introduce cambios significativos en la polarización neta que se induce en la celda [21].

Este último efecto, llamado de campo local, ha sido aplicado exitosamente para explicar ciertos experimentos de reflectancia diferencial en semiconductores [23]. El modelo descrito a continuación es una generalización del modelo usado en semiconductores aplicado al caso de metales. La presencia de los electrones de conducción en los metales, que apantallan y son fuente del campo local que siente y produce cada celda unitaria, introduce mecanismos novedosos mediante los cuales se modifica la respuesta dieléctrica cerca de la superficie.

c Modelo de Metal Incluyendo Estructura Cristalina.

En los metales nobles como la plata, se tienen 5 bandas de valencia d y un híbrido $s-p$ de bandas de conducción. Los electrones de las bandas d tienden a localizarse alrededor de los iones del metal, mientras que los electrones de conducción prevalecen en la zona intersticial. Para modelar esta situación procedemos como sigue. Alrededor de cada ion dibujamos una esfera imaginaria suficientemente grande como para que en la región fuera de las esferas haya principalmente electrones de conducción con una densidad aproximadamente constante. Dentro de la esfera quedan el ion, la mayoría de los electrones d , así como los electrones de conducción cercanos a los iones, todos ellos en una configuración de cargas y campos bastante complicada.

Si las esferas no se traslapan, el campo producido por las cargas en el interior se puede expandir multipolarmente en la región intersticial. Luego, modelamos la plata como una red cristalina fcc de cavidades esféricas inmersas en un gas de electrones uniforme, en cada una de las cuales se encierra un entidad polarizable, y cuya polarizabilidad incluirá en general contribuciones de las transiciones intrabanda, de las interbanda, y de la polarizabilidad del ion propiamente dicho. El momento dipolar inducido por el campo local que sienten los dipolos en la esfera es a su vez fuente de campo, el cual es apantallado por los electrones fuera de las esferas (ver figs. {1.a} y {1.b}).

Para mantener las cosas simples, modelamos los electrones de conducción suponiendo que responden como electrones libres e independientes, con una respuesta dieléctrica local tipo Drude, dada por

$$\epsilon_g(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}, \quad (16)$$

con ω_p la frecuencia de plasma del gas de electrones, y τ el tiempo de relajación. La ventaja de suponer local la respuesta del gas de electrones, es que resulta relativamente sencillo encontrar por integración directa una relación entre los momentos apantallados \mathbf{p}' que determinan el campo en la región intersticial, y la polarización total \mathbf{P} del sistema promediada en un plano cristalino. El promedio de la polarización total se hace en un volumen definido por todas las celdas unitarias de un plano cristalino paralelo a la superficie. Conforme nos alejamos de la superficie hacia dentro del metal, el vector polarización macroscópico tiende a su valor en el interior, y está dado en términos de los momentos dipolares apantallados y el campo externo \mathbf{E}^o por las relaciones

$$\mathbf{P}_\perp = n\mathbf{p}'_\perp + \chi_g \mathbf{E}_\perp^o / \epsilon_g \quad (17)$$

$$\mathbf{P}_{\parallel} = n\epsilon_g \mathbf{P}'_{\parallel} + \chi_g \mathbf{E}_{\parallel}^0, \quad (18)$$

donde denotamos por \perp y \parallel las proyecciones perpendicular y paralela a la superficie respectivamente, y definimos n como el número de celdas unitarias por unidad de volumen.

En (17) $\chi_g = (\epsilon_g - 1)/4\pi$ es la susceptibilidad del gas de electrones, y el vector de polarización total del sistema \mathbf{P} está relacionado con el campo macroscópico \mathbf{E}_M por medio de las relaciones

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \chi_{Ag} \mathbf{E}_M \\ &= \chi_{Ag} \{ \mathbf{E}_{\parallel}^0 + \mathbf{E}_{\perp}^0 / \epsilon_{Ag} \}, \end{aligned} \quad (19)$$

con $\epsilon_{Ag}(\omega) = 1 + 4\pi\chi_{Ag}(\omega)$ la función dieléctrica de la plata en su interior, bien conocida en el intervalo de frecuencias de interés [10].

Ahora bien, dado que son los momentos dipolares apantallados \mathbf{p}' los que determinan la contribución de una celda unitaria al campo local en las demás celdas unitarias, conviene definir una polarizabilidad efectiva en términos del campo local en una celda dada y los dipolos \mathbf{p}' , i.e.

$$\mathbf{p}'_i = \alpha \mathbf{E}_i^{loc}, \quad (20)$$

con \mathbf{E}_i^{loc} el campo local evaluado en la celda i 'ésima. En el interior, la corrección de campo local es la apropiada para cristales con simetría cúbica:

$$\mathbf{E}_{int}^{loc} = \mathbf{E}_M + \frac{4}{3}\pi n \mathbf{p}'. \quad (21)$$

Las ecuaciones (17), (18), (19) y (21) se pueden resolver para α y obtener

$$\alpha = \frac{3}{4\pi n} \frac{\epsilon_{Ag} - \epsilon_g}{\epsilon_{Ag} + 2\epsilon_g}, \quad (22)$$

ecuación a que conecta nuestro modelo microscópico con la respuesta dieléctrica experimental de la plata.

Hasta este punto, hemos considerado sólo relaciones entre diferentes cantidades en el interior del metal. En la superficie, el campo local que polariza a las moléculas, y por tanto, el valor de los vectores de polarización total y apantallado, cambia respecto a su valor en el interior. Un plano cristalino dado siente el campo producido por los demás planos cristalinos, y por los momentos dipolares imagen inducido en la superficie del gas de electrones, que en nuestro cálculo situamos media distancia interplanar hacia fuera del primer plano cristalino. Con dicha elección, las relaciones (17) son válidas introduciendo en todas las cantidades que aparecen un índice que etiquete los diferentes planos cristalinos. Así mismo, suponemos que la polarizabilidad efectiva de las celdas unitarias mantiene su valor en el interior, por lo que en nuestro modelo no incluimos efectos provenientes de la modificación de la estructura electrónica cerca de la superficie.

El sistema de ecuaciones acoplado a resolver para poder encontrar el cambio en la polarización en la superficie es

$$p'_i = \alpha \left[\mathbf{E}' + \sum_{i \neq j} T_{ij} p'_j + \sum_{j'} T_{ij'} p'_{j'} \right], \quad (23)$$

donde $\mathbf{E}' = (E'_x, E'_y, E'_z/\epsilon_g)$ juega el papel del campo externo apantallado en la dirección z por la superficie del gas de electrones. Así mismo, los dipolos p'_j inducen en dicha superficie dipolos imagen cuyas posiciones virtuales etiquetamos con índice primado j' , de modo que

$$p'_{j'} = \frac{\epsilon_g - 1}{\epsilon_g + 1} S p'_j \quad (24)$$

donde S es el operador de reflexión respecto a la frontera del gas de electrones, i.e. $S =$

$\text{diag}(1, 1, -1)$. Finalmente,

$$T_{ij} = \nabla_i \nabla_j \frac{1}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \quad (25)$$

es el tensor de interacción dipolar para dipolos situados en las posiciones $\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j$.

El sistema de ecuaciones acopladas se puede resolver numéricamente para las \mathbf{p}'_i haciendo una suma por planos [24]. Debido a la simetría del problema, los momento dipolares de los iones dependen sólo del plano cristalino paralelo a la superficie al que pertenecen. El campo producido por un plano de dipolos en un punto con coordenada z , se puede expresar como una suma de términos que decaen como $\exp(-g(z - z_m))$, con \mathbf{g} los vectores de la red recíproca bidimensional del plano cristalino, y z_m la posición del mismo. Luego, la suma converge rápidamente, y el sistema de ecuaciones (23) se puede invertir sin mucho problema con la condición de frontera de que los momento dipolares tomen el valor correspondiente al interior conforme nos alejamos de la superficie hacia dentro del material.

Una vez hecho ésto, se obtienen las conductividades superficiales definidas en (11) usando la relación

$$\sigma_{xx} = -i\omega a \frac{\epsilon_{A2} - \epsilon_2}{4\pi} \sum_m \frac{(\mathbf{p}'_m)_x - (\mathbf{p}'_B)_x}{(\mathbf{p}'_B)_x} \quad (26)$$

$$s_{xz} = -i\omega a \frac{\epsilon_{A2} - \epsilon_2}{4\pi \epsilon_{A2} \epsilon_2} \sum_m \frac{(\mathbf{p}'_m)_x - (\mathbf{p}'_B)_x}{(\mathbf{p}'_B)_x}, \quad (27)$$

donde escogimos al eje x en la dirección paralela (\parallel) a la superficie. En (26) B denota el valor asintótico del momento dipolar en el interior, a es la distancia interplanar, y m numera los planos cristalinos.

Habiendo calculado las conductividades superficiales, podemos entonces obtener el cambio en las diferentes propiedades ópticas a través de ecuaciones como (15) ó (7). Para finalizar esta sección, vamos a enumerar todos los parámetros de entrada del cálculo:

- Los parámetros del cristal (en nuestro caso, un cristal fcc con el parámetro de red correspondiente a la plata).
- Las caras cristalinas paralelas a la superficie, y en el caso de las cara Ag(110), la orientación del vector de polarización del campo eléctrico respecto a las direcciones $[001]$ y $[1\bar{1}0]$. Esta elección determina los tensores de interacción dipolar entre planos.
- La función dieléctrica en el interior de la plata, usualmente obtenida de experimentos que miden espectros de absorción de fotones o de pérdida de energía electrónica, susceptibles a un análisis de Kramers-Kronig.
- La frecuencia de plasma ω_p y el tiempo de relajación τ del gas de electrones tipo Drude.

Una vez fijos los anteriores parámetros, se puede estudiar la dependencia con la frecuencia ω y con el vector de onda paralelo a la superficie \mathbf{Q} de las diferentes correcciones a las propiedades ópticas del metal.

IV Experimentos de EELS.

En los experimentos de EELS en los que estamos interesados, se tienen electrones que inciden a cierta energía y momento prefijados sobre la superficie del material que se quiere estudiar. Midiendo las deflexiones que sufre el electrón respecto a la dirección especular, y aplicando leyes de conservación de la energía y momento, se puede en principio inferir el espectro de excitaciones Q vs. ω de los modos de superficie, con Q el vector de onda que modula la propagación del modo a lo largo de la superficie.

Si pensamos al electrón incidente como un paquete de ondas localizado descrito por cierta función $\Psi(\mathbf{r}, t)$, entonces en general dicho paquete de onda se puede expresar como una superposición de funciones de onda $\psi(\mathbf{Q}, \omega, z)$, cada una con un valor definido de la energía ω y momento paralelo a la superficie Q . Lejos de la región superficial propiamente dicha (i.e. distancias del orden de \AA), el electrón incidente interactúa con el material a través de los campos producidos por la polarización inducida en la superficie por su propio campo. El acoplamiento entre el electrón y la polarización inducida es resonante para aquellas componentes de la función de onda cuya ω y Q coincide con la ω y Q de alguno de los plasmones de superficie, por lo que estos últimos constituyen una canal importante de dispersión inelástica. Así mismo, debido a que cada componente de Fourier con vector de onda Q del campo inducido debe satisfacer la ecuación de Laplace en el vacío (i.e. una dependencia en z de la forma $\exp(-Qz)$), se sigue que la interacción coulombiana del electrón incidente con el medio es efectiva sólo a una distancia de la superficie del orden de $2\pi/Q$; es claro entonces que la interacción se puede tratar en el límite no retardado siempre y cuando $\omega/c \ll Q$, condición satisfecha para las energías y momentos involucrados en los

experimentos usuales de EELS.

Al reflejarse el electrón incidente en la superficie, pueden suceder dos cosas:

1) El electrón es dispersado casi especularmente, cediendo poco o nada de la componente paralela de su momento a la superficie al momento del impacto.

2) El electrón puede sufrir deflexiones arbitrariamente grandes, y cambiar su momento total en una porción apreciable de su momento inicial. Ello puede suceder, por ejemplo, debido a que existe una amplitud de probabilidad finita de que el electrón incidente induzca, al momento de la colisión, transiciones entre orbitales atómicos cuyas funciones de onda incluyen una superposición de vectores de onda mucho mayores que el vector de onda incidente.

En el primer caso se dice que la dispersión se da en el régimen dipolar, enfatizando el que en tal evento, es principalmente la interacción con los campos dipolares inducidos en el medio la que determina el espectro de dispersión del electrón. Debido a ello, es posible hacer un análisis de este último en términos de cantidades puramente cinemáticas y la respuesta dieléctrica del interior y de la superficie del metal.

En el segundo caso se habla de régimen de impacto. En este caso es necesaria una descripción microscópica del modo en que el electrón es dispersado por los primeros planos cristalinos, y un tratamiento teórico realista presenta gran dificultad. Típicamente, la dispersión de impacto aparece como un fondo difuso al máximo pronunciado que se forma alrededor de la dirección especular [2].

En la siguiente sección implementamos una teoría semi-clásica que nos permite obtener una expresión que conecta las propiedades dieléctricas de un medio semi-infinito con la señal de EELS a la que dicho medio daría lugar. Asumimos que el proceso de dispersión

es correctamente descrito en el régimen dipolar.

Un tratamiento cuántico completo requiere aplicar teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. La teoría que usamos aquí es semi-clásica pues consideramos los electrones reflejándose especularmente siguiendo trayectorias clásicas, ignorando cualquier efecto de dispersión múltiple o de interferencia entre el haz incidente y el reflejado.

a Teoría Semi-clásica de EELS.

Considerese un electrón que incide a cierto ángulo sobre la superficie de un medio semi-infinito, donde se refleja especularmente. Escogemos el eje Z en la dirección normal a la superficie, y el origen del tiempo de forma que a $t = 0$, el electrón se encuentra a $z = 0$. Suponemos que antes y después de la reflexión, el electrón se mueve a velocidad constante, de modo que su movimiento está descrito por

$$\mathbf{v}(t) = v_{\parallel} + \text{sgn}(t)v_{\perp} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r}'(t) &= \rho'(t) + \mathbf{z}'(t) \\ &= e_{\parallel}v_{\parallel}t + e_{\perp}v_{\perp}|t|, \end{aligned} \quad (29)$$

donde los sufijos \parallel y \perp indican paralelo y normal a la superficie respectivamente, y $\text{sgn}(t)$ es la función signo.

Queremos calcular el trabajo total realizado sobre el electrón por los campos que éste induce en la superficie del metal. En la aproximación dipolar, el trabajo invertido en mantener al electrón moviéndose a velocidad constante es igual a la energía que el electrón pierde debido a las corrientes de polarización que induce en el medio, que por hipótesis son

los únicos canales disipativos en el problema. Dicha energía está dada por

$$W = e \int_{-\infty}^{+\infty} dt \mathbf{E}_{ind}(\mathbf{r} = \mathbf{r}'(t), t) \cdot \mathbf{v}(t), \quad (30)$$

con e la carga del electrón y $\mathbf{E}_{ind}(\mathbf{r}, t)$ el campo eléctrico producido por las cargas inducidas en el medio, dado por

$$\mathbf{E}_{ind}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \phi_{ind}(\mathbf{r}, t). \quad (31)$$

Para calcular el potencial inducido ϕ_{ind} procedemos como sigue. Primer notamos que, en el límite no retardado, el potencial producido por el electrón incidente está dado simplemente por

$$\phi_{ext}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'(t)) = \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'(t)|}. \quad (32)$$

Tomando la transformada de Fourier de dicho potencial respecto al tiempo y la componente del vector posición paralela a la superficie obtenemos

$$\phi_{ext}(\mathbf{Q}, \omega, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^2\rho \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'(t)|} \exp[-i\mathbf{Q} \cdot \rho] \exp[i\omega t] \quad (33)$$

$$= \frac{2\pi e}{Q} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-Q|z - v_{\perp}|t|) \exp[i(\omega - \mathbf{Q} \cdot \mathbf{v}_{\parallel})t] \quad (34)$$

$$= \frac{4\pi e v_{\perp}}{Q^2 v_{\perp}^2 + \omega^2} (2 \cos[(\omega - \mathbf{Q} \cdot \mathbf{v}_{\parallel})z/v_{\perp}] - 1). \quad (35)$$

A continuación introducimos un coeficiente de reflexión $R(\mathbf{Q}, \omega)$ definido como

$$R(\mathbf{Q}, \omega) = -\frac{\phi_{ind}(\mathbf{Q}, \omega, z = 0^+)}{\phi_{ext}(\mathbf{Q}, \omega, z = 0^+)}, \quad (36)$$

que no es más que el coeficiente de reflexión para polarización p en el límite no retardado.

Tomando este límite en la expresión (7) obtenemos

$$R(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\epsilon(\mathbf{Q}, \omega) - 1}{\epsilon(\mathbf{Q}, \omega) + 1}, \quad (37)$$

donde $\epsilon(\mathbf{Q}, \omega)$ incluye en principio cualquier corrección pertinente a la respuesta dieléctrica cerca de la superficie.

Usando (33) y (36) y tomando las transformadas de Fourier inversas en ω y \mathbf{Q} , obtenemos que el potencial inducido en el semiespacio $z > 0$ como función de \mathbf{r} y t está dado por

$$\phi_{ind}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^2\mathbf{Q}}{4\pi^2} \left\{ \frac{4\pi e v_{\perp}}{Q^2 v_{\perp}^2 + (\omega - Q v_{\parallel})^2} \right\} R(\mathbf{Q}, \omega) \exp[-Qz] \exp[i(\mathbf{Q} \cdot \rho - \omega t)]. \quad (38)$$

Una vez que se tiene la expresión para el potencial inducido, es directo evaluar la integral (30). El operador gradiente introduce un factor $(i\mathbf{Q} - Q\mathbf{e}_{\perp})$ en el integrando de (38). Evaluando el campo eléctrico en la posición del electrón, tomando el producto punto del mismo con el vector velocidad, y realizando la integral sobre el tiempo, se llega finalmente a la siguiente expresión para W :

$$W = \int_0^{\infty} d\omega \int d^2\mathbf{Q} \left\{ \frac{2e^2 v_{\perp}^2 \omega Q}{\pi^2 [Q^2 v_{\perp}^2 + (\omega - Q v_{\parallel})^2]^2} \right\} Im\{R(\mathbf{Q}, \omega)\}. \quad (39)$$

Esta última expresión se puede expresar como sigue

$$W = \int_0^{\infty} d\omega \int d^2\mathbf{Q} \hbar \omega P(\omega, \mathbf{Q}), \quad (40)$$

donde definimos

$$P(\omega, \mathbf{Q}) = \left\{ \frac{2e^2 v_{\perp}^2 Q}{\pi^2 \hbar [Q^2 v_{\perp}^2 + (\omega - Q v_{\parallel})^2]^2} \right\} Im\{R(\mathbf{Q}, \omega)\}. \quad (41)$$

La expresión (40) sugiere interpretar a $P(\omega, \mathbf{Q})$ como la probabilidad de que el electrón en su trayectoria ceda un cuanto de energía $\hbar\omega$ y momento $\hbar\mathbf{Q}$ a la superficie. Para

confirmar esta interpretación, considerese el momento total que se tiene que suministrar al electrón en la dirección paralela para mantenerlo a velocidad constante:

$$\Pi_{\parallel} = e \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r} = \mathbf{r}'(t), t), \quad (42)$$

con \mathbf{E}_{\parallel} la componente del campo eléctrico inducido paralela a la superficie. Este campo se obtiene simplemente introduciendo un factor $i\mathbf{Q}$ en el intergrando de la expresión del potencial inducido (38). Realizando explícitamente la integral en el tiempo obtenemos en analogía con (40) que

$$\Pi_{\parallel} = \int_0^{\infty} d\omega \int d^2\mathbf{Q} \hbar \mathbf{Q} P(\omega, \mathbf{Q}), \quad (43)$$

con la misma expresión (41) para $P(\omega, \mathbf{Q})$. Este resultado refuerza la interpretación física dada arriba a $P(\omega, \mathbf{Q})$.

De la expresión (41) para $P(\omega, \mathbf{Q})$ se puede apreciar que toda la información acerca de los modos de superficie del sistema entra a través de la parte imaginaria del coeficiente de reflexión en el límite no retardado R . De acuerdo a la teoría de respuesta lineal usual, la relación de dispersión de las excitaciones elementales de un metal está dada implícitamente por los polos de las funciones respuestas apropiadas a la interacción de dichos modos con las diversas perturbaciones externas. En el caso de una distribución de carga externa que interactúa con la superficie en el límite no retardado, la respuesta está determinada por R , que no es sino el valor relativo de la carga imagen que se induce en la superficie del metal respecto a la carga externa. Así pues, la relación de dispersión de los plasmones de superficie está dada por los polos de R en el plano complejo ω para las diferentes \mathbf{Q} . Si la parte imaginaria de un polo en particular es pequeña, entonces la señal de EELS mostrará un máximo agudo cerca de la frecuencia igual a la parte real de dicho polo. Por el contrario,

una parte imaginaria grande implica un fuerte amortiguamiento del modo colectivo debido a la excitación de pares electrón-hoyo o cualquier otro canal de disipación, y en la señal de EELS el modo se pierde en un fondo difuso.

En nuestro caso, y de acuerdo al formalismo perturbativo expuesto en la sección anterior, el coeficiente de reflexión en el límite no retardado está dado en término de las conductividades superficiales (11)-(13) por la relación

$$R(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\omega(\epsilon_{Ag} - 1) + 4\pi i Q(\sigma_{xx} + \epsilon_{Ag} s_{xx})}{\omega(\epsilon_{Ag} + 1) + 4\pi i Q(\sigma_{xx} - \epsilon_{Ag} s_{xx})}. \quad (44)$$

Nótese que conforme \mathbf{Q} crece, aumenta la contribución de los términos perturbativos. Esto es de esperarse dado que el plasmón de superficie involucra una región alrededor de la superficie del orden de $2\pi/Q$, por lo que a mayor valor de Q , mayor es la localización del modo en la región superficial, y por tanto mayor su sensibilidad al detalle de ésta.

V Resultados y Discusión.

Antes de presentar nuestros resultados aplicados a los experimentos discutidos en la introducción, conviene detenerse para discutir brevemente las propiedades dieléctricas en el interior de la plata.

a Propiedades dieléctricas en el interior de la plata.

En la figura {2} mostramos la parte real e imaginaria de la función dieléctrica de la plata ϵ_{Ag} en el intervalo de frecuencias de interés. La tres flechas en el eje horizontal señalan la posición aproximada de las frecuencias a las que la parte real de la función dieléctrica pasa por -1, 0, y 1.

A $\omega_{sp} \simeq 3.63eV$, $\epsilon'_{Ag} \simeq -1$, que corresponde a la posición del plasmón de superficie en el límite no retardado de acuerdo a la teoría clásica (de aquí en adelante cantidades primadas indican parte real, doble primadas parte imaginaria). En los experimentos de EELS de reflexión aparece a ω_{sp} un máximo pronunciado en el límite $Q \rightarrow 0$. A $\omega \simeq 3.77eV$, $\epsilon'_{Ag} \simeq 0$, que corresponde al plasmón de volumen de la plata. A esta frecuencia se detecta un máximo pronunciado en la pérdida de energía de electrones que atraviesan el interior de cristales de plata (EELS de transmisión). Finalmente a $\omega \simeq 3.85$ se tiene $\epsilon'_{Ag} \simeq 1$, de modo que la impedancia superficial toma un valor cercano a la impedancia superficial del vacío, lo que se traduce en un mínimo notable en la reflectancia óptica de la plata a esta frecuencia (figura {3}). Nótese también que a partir $\omega \simeq 3.9eV$, ϵ'_{Ag} crece monótonicamente. Ello es debido al inicio de las transiciones interbanda, que se convierten en un canal importante de absorción de energía. En la figura {4} mostramos el espectro de bandas de energía

para la plata a lo largo de algunas de las direcciones de simetría de su red recíproca, de acuerdo a la referencia [25]. En la figura se aprecia el complejo de bandas d debajo del nivel de Fermi, resaltando el carácter localizado de su relación de dispersión. En contraste, la dispersión de las bandas $s-p$ de conducción se asemejan más a las simples parábolas de un gas de electrones libres. El inicio de las transiciones interbandas está determinado por la primera transición permitida por el principio de exclusión. Como el momento de los fotones incidentes ($\simeq 2\pi\hbar/\lambda$) es mucho menor que el tamaño de las zonas de Brillouin ($\simeq 2\pi\hbar/a$, con a el parámetro de red), las transiciones aparecen en un esquema de bandas como líneas verticales que conectan estados ocupados con estados desocupados. En la figura señalamos con flechas algunas posibles transiciones.

b Conductividad Superficial de la plata.

En los resultados presentados a continuación, aparte de usar la función dieléctrica y parámetros de red correspondientes a la plata, para el gas de Drude se tomó $\omega_p = 7.5eV$ y $\tau = 400/\omega_p$. Aunque ambas variables se pueden considerar como parámetros ajustables del cálculo, no está de más mencionar que a $\omega = 7.5eV$ los experimentos que miden la pérdida de energía de electrones que atraviesan el interior de la plata muestran un máximo local de menor intensidad y más ancho que el correspondiente a $\omega \simeq 3.77eV$. Dicho máximo se asocia [10] a oscilaciones de plasma de los electrones de conducción, cuya frecuencia se ve corrida al rojo respecto a su valor teórico $\simeq 9.2eV$ debido a transiciones interbanda de alta energía. El tiempo de relajación τ se tomó independiente de la frecuencia, y se fijó de acuerdo a la conductividad DC de la plata. El cálculo resulta poco sensible a la elección de τ dentro de un intervalo razonable de valores de dicho parámetro.

En la figura {5} mostramos la polarizabilidad efectiva normalizada $\gamma = n\alpha$ como función de la frecuencia, con α dada por la ecuación (22). La interpretación física de esta polarizabilidad no es tan transparente como uno quisiera, pues recuérdese que incluye contribuciones tanto de los iones como de los electrones intersticiales, y se define en término de los momentos dipolares apantallados p' (cf. (20)). Con todo, su comportamiento indica que es sólo a partir del inicio de la transiciones interbanda que juega un papel importante.

En la figuras {6.a} y {6.b} mostramos la parte real de las conductividades superficiales (26) como función de la frecuencia calculadas para las diferentes caras cristalinas y direcciones de la plata. La conductividad normal s_{zz} a la superficie (fig. {6.b}) muestra cualitativamente la misma estructura para las tres caras cristalinas. En cambio, en la conductividad paralela (fig. {6.a}) resalta una fuerte dependencia con la geometría superficial. En contraste con las direcciones (100) y (111), las caras (110) muestran resonancias bien definidas, y la posición de dichas resonancias depende notablemente de la dirección relativa entre el vector de polarización del campo paralelo a la superficie y las dos direcciones principales de la cara cristalina. Para la dirección $[1\bar{1}0]$ la resonancia se da alrededor de 3.9 eV, mientras que para la $[001]$ la resonancia se da alrededor de 3.73 eV. En la figura {7} mostramos la parte imaginaria de las conductividades paralelas a la superficie para el caso Ag(110), donde de nuevo se aprecian las estructuras resonantes para la conductividad paralela.

Para entender el origen físico de las resonancias en la conductividad paralela y su dependencia respecto a la dirección de los planos cristalinos, considerese el caso extremo en que se retiene sólo la interacción de los dipolos del primer plano cristalino con su imagen y consigo mismo. Con los dipolos orientados paralelamente a la superficie, el sistema de

ecuaciones (23) se reduce a

$$P'_0 = \gamma \left[E_o + T_{oo} P'_0 + \frac{\epsilon_g - 1}{\epsilon_g + 1} T'_{oo} P'_0 \right], \quad (45)$$

donde $\gamma = n\alpha$, T_{oo} determina el campo que un dipolo siente debido a los dipolos en su propio plano cristalino y T'_{oo} el debido a los dipolos imagen. La condición para una interacción resonante corresponde a tener un momento dipolar finito en ausencia de campo externo.

Haciendo $E_o = 0$ en (45) obtenemos

$$\frac{\epsilon_g - 1}{\epsilon_g + 1} = -\frac{1}{T'_{oo}} \left[T_{oo} - \frac{1}{\gamma} \right]. \quad (46)$$

Dependiendo de los valores de los tensores T_{oo} y T'_{oo} , la frecuencia a la que (46) se cumple varía. Para la dirección $[1\bar{1}0]$ se tiene $T_{oo} \simeq 3.4$ y $T'_{oo} \simeq -3.75$, y la parte real de la frecuencia la que se cumple (46) se sitúa alrededor de $3.8eV$, mientras que para la dirección $[001]$ $T_{oo} \simeq 0.64$ y $T'_{oo} \simeq -5.08$, y la ecuación (46) se cumple para $\omega \simeq 3.5eV$. Estas frecuencias coinciden aproximadamente con las frecuencias en las que se observan las resonancias en la conductividad al realizar el cálculo completo.

c Señal de EELS.

Pasamos ahora a presentar las predicciones de nuestro modelo para el cambio de la relación de dispersión del plasmón de superficie debido a la corrección de campo local. Para ello, procedemos como sigue. Para \mathbf{Q} fija, calculamos la señal de EELS $Im(r_p)$ como función de la frecuencia, con r_p dado por (44). La relación de dispersión de los plasmones de superficie se puede entonces construir asociando a cada \mathbf{Q} la frecuencia a la que la señal de EELS presenta un máximo definido. De acuerdo a la expresión (44), en el límite $\mathbf{Q} = 0$ no hay

corrección alguna, por lo que en todos los casos la señal de EELS presenta solamente el máximo clásico a $\omega_p \simeq 3.63\text{eV}$. Conforme Q aumenta, la contribución de los términos en las conductividades superficiales se hacen más importantes, lo que es de esperarse dado que la distancia de penetración de los campos electromagnéticos dentro del medio va como el inverso de Q , de modo que a menor Q mayor es la localización del modo en la región superficial.

En la figura {8} mostramos las señales de EELS predichas por nuestro modelo para las diferentes caras cristalinas de la plata como función de la frecuencia, con $Q = 0.15\text{\AA}^{-1}$. Notamos que para las caras (111) y (100) aparece un sólo máximo ligeramente corrido al rojo respecto al valor clásico, que en la figura indicamos con una línea vertical. Dicho corrimiento se origina debido a la pequeña resonancia en s_z , cercana a 3.75eV , que se aprecia en la figura {6.b}. En contraste, la señal de EELS presenta una estructura mucho más rica para la cara (110). Para las dos direcciones de propagación de esta cara, el plasmón clásico aparece amortiguado, y se aprecian nuevos máximos a su derecha y a su izquierda. La posición de dichos máximos cambia según el campo eléctrico tenga componente en la dirección $[1\bar{1}0]$ o en la dirección $[001]$.

En las figuras {9} y {10} mostramos en perspectiva la evolución de la señal de EELS para las dos direcciones de superficie (110) conforme aumenta Q , donde se aprecia la aparición gradual de los nuevos modos conforme aumenta el vector de onda. En las figuras {11} y {12} presentamos un proyección topográfica de las curvas de nivel correspondientes a las figuras {9} y {10}. La posición de los máximos para los diferentes vectores de onda determina la relación de dispersión de los plasmones. En la figura {13} mostramos la relación de dispersión de los modos colectivos para las diferentes direcciones y caras cristalinas.

Para entender el origen de los nuevos modos en las superficies (110), recordemos que la relación de dispersión de los mismos está dada implícitamente por los polos de r_p . Aunque estos polos se encuentran en general en el plano complejo, en primera aproximación podemos suponer que las frecuencias corresponderán a aquellas para las cuales la parte real del denominador de (44) se anula, i.e.

$$\omega(\epsilon'_{Ap} - 1) = 4\pi Q(\sigma_{xx} - \epsilon_{Ap} s_{xx})'' \quad (47)$$

En la figuras {14} y {15} mostramos gráficas de ambos lados de (47) con diferentes valores de Q para las dos direcciones de la superficie (110). Para cada Q , la posición de los plasmones está dada por las frecuencias a las que las curvas correspondientes al lado derecho de (47) se intersectan con la curva del lado izquierdo. Conforme Q crece, la resonancia de las conductividades superficiales se 'amplifica' y modifica la posición de los plasmones. El número de intersecciones entre ambas curvas y por tanto, el número de resonancias en la conductividad, depende de Q . De la figura se puede apreciar el origen de la dependencia en la cara y dirección cristalina de los modos de superficie y del signo de la pendiente de su relación de dispersión.

Nuestro modelo predice cambios notables en la relación de dispersión de los plasmones de superficie según la cara cristalina de la plata por la que se propaguen, y en el caso de las cara (110), dependiendo de la dirección de propagación. Sin embargo, aunque dicha dependencia se ha detectado, nuestro cálculo de las relaciones de dispersión de los plasmones no coincide con las obtenidas experimentalmente [14] [15]. Ello indica que se necesitan modelos más refinados que describan de forma realista a la superficie de la plata. Nuestro modelo no toma en cuenta efectos de la dispersión espacial del gas de electrones, o la forma detallada

del perfil de densidad cerca de la superficie, ni posibles contribuciones debido a los estados de superficie. Con todo, nuestros resultados revelan la importancia de incorporar el efecto de campo local para poder entender la respuesta superficial de metales cristalinos.

d Cálculo de la Reflectancia Superficial.

Usando exactamente los mismos parámetros que en el cálculo de la señal de EELS, se calculó el cambio en la reflectancia respecto a la dirección del vector de polarización del campo eléctrico como función de la frecuencia para luz a que incide normalmente sobre un cristal de plata $Ag(110)$. En la figura {16} mostramos los resultados obtenidos. Nuestro modelo predice un cambio del orden del 20% en la reflectividad cuando la dirección del vector de polarización de la luz incidente cambia respecto a las direcciones $[001]$ y $[1\bar{1}0]$ de la superficie. Según nuestros resultados, en un experimento que mida

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{[1\bar{1}0]} - R_{[001]}}{R_{Ag}} \quad (48)$$

se debe detectar una anisotropía notable que cambia de signo negativo a positivo alrededor de $3.84eV$. En (48), $R_{[1\bar{1}0]}$ y $R_{[001]}$ corresponden a la reflectancia para vector de polarización paralelo a las direcciones $[1\bar{1}0]$ y $[001]$ respectivamente, y R_{Ag} denota la reflectancia de la plata calculada de acuerdo a las formulas de Fresnel (figura {2}).

En la figura {17} mostramos resultados experimentales muy recientes [20] en los que los autores miden

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{[001]} - R_{[1\bar{1}0]}}{R_{[001]}} \quad (49)$$

que para todo fin práctico equivale al negativo de la expresión (48). En la gráfica se muestran los resultados para un cristal $Ag(110)$ con su superficie limpia, y los correspondientes

al mismo cristal pero después de haberlo dejado a la interperie por tres días.

El efecto de la oxidación influye en la magnitud mas no en el comportamiento cualitativo general del espectro de reflectancia diferencial. El parecido con nuestras predicciones es sorprendente dada la simplicidad del modelo usado.

Antes de terminar esta sección quisieramos hacer algunos comentarios respecto a las posibles causas por las que nuestro modelo da tan buenos resultados para el caso de los experimentos de reflectancia diferencial, y sin embargo falla en describir correctamente el cambio en la dispersión de plasmón de superficie de la plata. Una de las debilidades principales del modelo es que parte de una descripción local de la respuesta del gas de electrones que rodea a los iones. En una descripción más realista se debe tomar en cuenta de forma auto-consistente la redistribución en la densidad electrónica que necesariamente se da cerca de la superficie respecto a la densidad electrónica en el interior. Esta carencia del modelo no es tan importante para el caso de situaciones experimentales en las que se tienen sólo campos incidentes paralelos a la superficie, como es el caso de los experimentos de reflectancia diferencial a incidencia normal [6]. Sin embargo, en la propagación del plasmón no sólo intervienen campos perpendiculares a la superficie, sino que el signo mismo de la relación de dispersión depende críticamente de la localización del centroide de la densidad electrónica superficial [7].

VI Conclusiones. Parte I.

En esta primera parte de nuestro trabajo hemos desarrollado un modelo de metal que nos permite calcular el cambio en las propiedades ópticas de los metales debido al efecto de campo local cerca de la superficie. El modelo incorpora en el cálculo contribuciones tanto de la red de iones como de los electrones de conducción, y establece un mecanismo resonante novedoso originado en la interacción dipolar de los primeros planos cristalinos entre sí y con las imágenes que producen. Consideramos que el trabajo representa un avance importante en el entendimiento de las propiedades ópticas de los metales, y permite incorporar efectos cuyo tratamiento *ab initio* resulta muy difícil. Además, se predice una anisotropía gigante en la reflectancia diferencial de la Ag que ha sido de hecho observada, con una coincidencia significativa entre teoría y experimento [18] [20]. Cabe resaltar que los experimentos a los que aludimos fueron motivados por las predicciones teóricas presentadas en el presente trabajo.

PIES DE FIGURA PARTE I

Figs. (1.a) y (1.b): Visión esquemática de nuestro modelo de metal. La función dieléctrica macroscópica del metal se puede relacionar con la función dieléctrica del gas de electrones y la polarizabilidad de los iones promediando en una rebanada las diferentes contribuciones al vector de polarización (Fig. (1.a)). Cerca de la superficie (Fig. (1.b)), los momentos dipolares de los primeros planos cristalinos inducen momentos dipolares imagen en la frontera del gas de electrones. La interacción entre los planos cristalinos y los planos imagen dan una contribución importante a la respuesta superficial.

Fig. (2): Parte real e imaginaria de la función dieléctrica de la plata en el intervalo de frecuencias de interés. Las tres flechas indican sucesivamente las frecuencias para las cuales $Re(\epsilon_{Ag}) \simeq -1$, $Re(\epsilon_{Ag}) \simeq 0$, y $Re(\epsilon_{Ag}) \simeq 1$. El súbito incremento en el valor de la parte imaginaria alrededor de $\omega \simeq 3.9eV$ marca el inicio de las transiciones interbanda.

Fig. (3): Reflectancia de la plata como función de la frecuencia. Nótese el mínimo a la frecuencia a la que $Re(\epsilon_{Ag}) \simeq 1$.

Fig. (4): Esquema de bandas calculado para la plata a lo largo de ciertas direcciones de simetría, de acuerdo a Ref. [25]. Resalta el carácter localizado del complejo de bandas d en contraste a las bandas $s-p$ de conducción, que se asemejan más a bandas de electrón libre. En la figura se señalan algunas de las transiciones permitidas por el principio de exclusión de Pauli.

Fig.(5): Dependencia con la frecuencia de la parte real e imaginaria de la polarizabilidad efectiva α dada por la ecuación (22). En la figura se grafica la cantidad adimensional $n\alpha$, con n el inverso de la celda primitiva de la plata.

Figs. (6.a) y (6.b): Parte real de las conductividades superficiales normalizadas para las diferentes caras cristalinas de la plata, como función de la frecuencia. En la figura (6.a) se muestra la conductividad paralela a la superficie para las direcciones $(110)[1\bar{1}0]$ (línea continua), $(110)[001]$ (línea punteada) (111) (línea a rayas) y (100) (línea a rayas y puntos). Resalta la fuerte dependencia de la respuesta superficial con la cara cristalina, y en el caso de las caras $\text{Ag}(110)$, con la dirección cristalográfica. En la fig. (6.b) se muestra la respuesta a campos perpendiculares a la superficie, que es casi un orden de magnitud menor que la correspondiente a campos paralelos.

Fig.(7): Parte imaginaria de las conductividades superficiales normalizadas para un cristal de plata $\text{Ag}(110)$. La frecuencia a la que se da la resonancia en la conductividad paralela depende marcadamente de la dirección cristalográfica.

Fig.(8): Señal de EELS calculada con nuestro modelo para las diferentes caras y direcciones cristalográficas de cristales de plata. La línea vertical alrededor de $\omega \simeq 3.63\text{eV}$ marca la posición del plasmón de superficie de acuerdo a la teoría clásica de Fresnel. La curva continua corresponde a un cristal $\text{Ag}(110)$ cuando la componente paralela a la superficie del campo coincide con la dirección $[1\bar{1}0]$, mientras que la línea punteada corresponde

al caso en que el campo apunta en la dirección [001]. La curva a rayas y la curva a rayas y puntos corresponden a las superficies (111) y (100) respectivamente.

Fig.(9): Comportamiento de la Señal de EELS de acuerdo a nuestro modelo, como función de la frecuencia y el vector de onda para el caso $\text{Ag}(110)[1\bar{1}0]$. Conforme Q_{\parallel} aumenta, aparece un nuevo modo con una frecuencia mayor que el modo clásico.

Fig.(10): Lo mismo que la figura (9), pero para el caso $\text{Ag}(110)[110]$. La escala es diferente a la de la figura (9).

Figs. (11) y (12): Proyecciones topográficas de las figuras (9) y (10) respectivamente, mostrando las curvas de nivel de la señal de EELS. Las figuras permiten visualizar la relación de dispersión de los modos de superficie, localizando los máximos en la señal de EELS.

Fig. (13): Relación de dispersión ω vs Q para los modos superficiales de la plata. Resaltan los casos de propagación a lo largo de las direcciones $[1\bar{1}0]$ (línea continua) y $[001]$ (línea punteada) de las superficies (110). Así mismo se muestran los modos para superficies (111) (línea a rayas) y (100) (línea a rayas y puntos).

Fig. (14): Aquí mostramos la solución gráfica de la ecuación (47) para diferentes valores de Q , para el caso $\text{Ag}(110)[1\bar{1}0]$. Para cada Q , la posición de los plasmones está dada por las frecuencias a las que las curvas se intersectan.

Fig. (15): Lo mismo que en la figura (14), pero para el caso $\text{Ag}(110)\{001\}$.

Fig.(16): Predicción de nuestro modelo del cambio en la reflectancia óptica para un cristal $\text{Ag}(110)$ debido al efecto de campo local, respecto a la reflectancia calculada de acuerdo a la formulas de Fresnel. La curva de línea continua corresponde al caso de luz polarizada en la dirección $[1\bar{1}0]$, mientras que la línea punteada corresponde al caso $\{001\}$.

Fig.(17): Resultados experimentales reportados por los dos primero autores de [20]. En la figura de línea continua se muestra $(R_{\{001\}} - R_{[1\bar{1}0]})/R_{\{001\}}$ para un cristal $\text{Ag}(110)$ limpio, mientras que la línea a rayas y puntos corresponde a dicha cantidad pero después de exponer el cristal a la interperie durante tres días.

Fig. 1

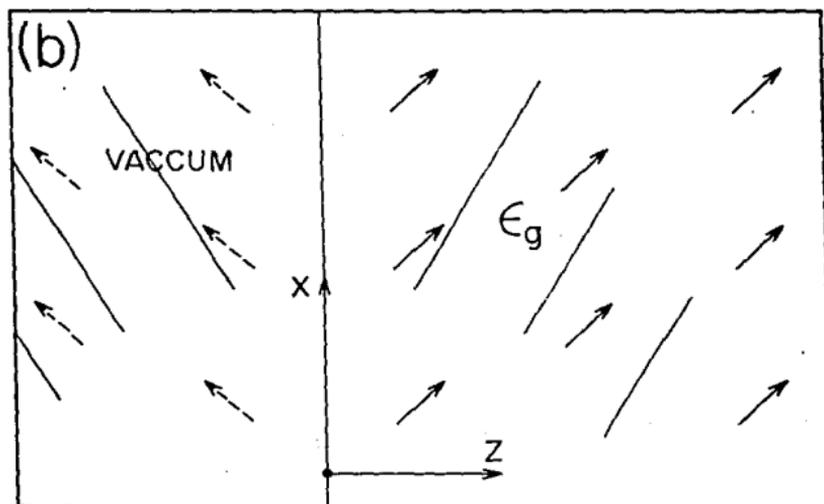
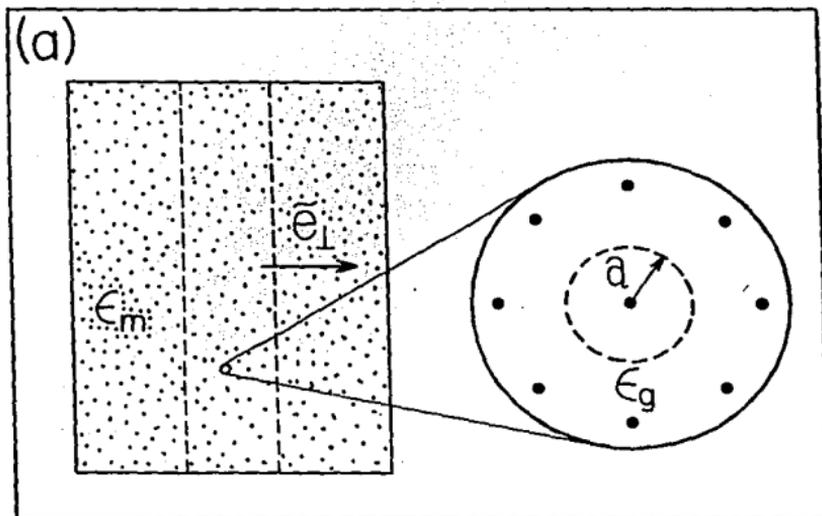


Fig. 2

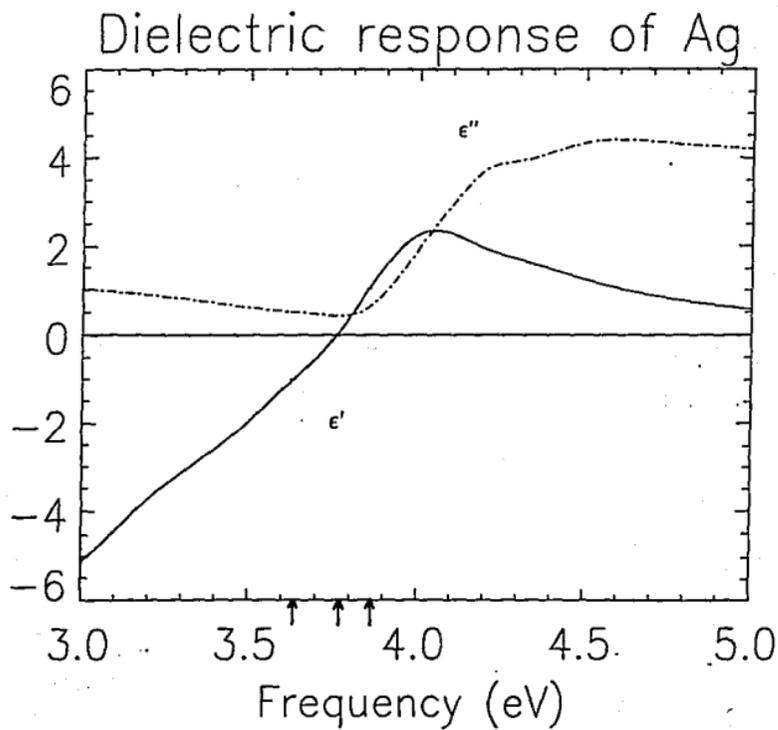
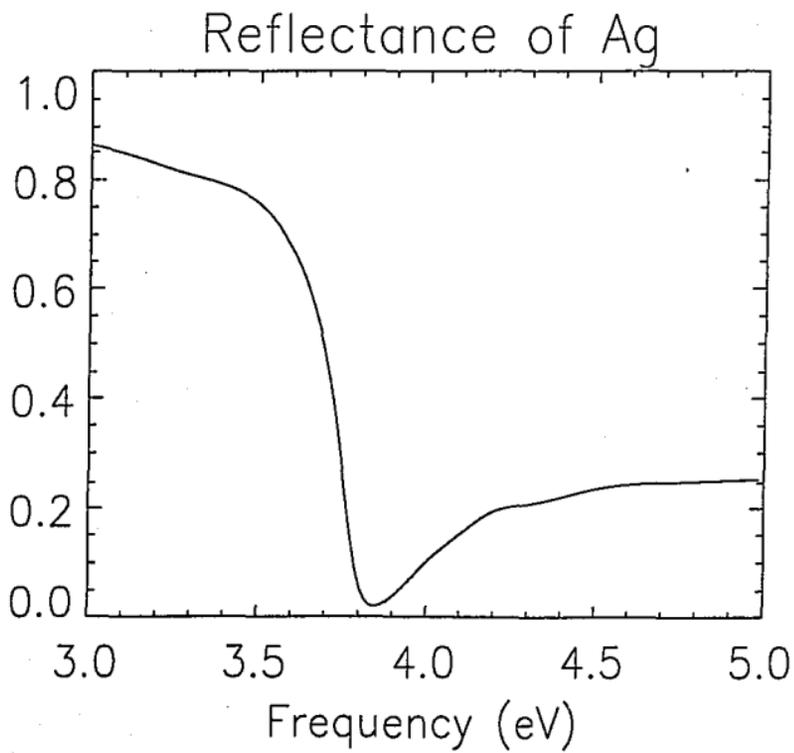


Fig. 3



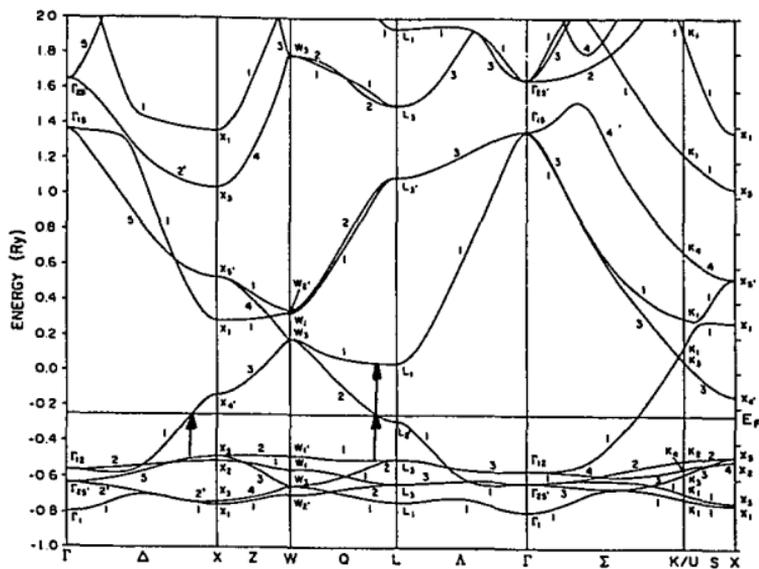


FIG. 1. Energy bands of fcc silver along some lines of symmetry.

Fig. 5

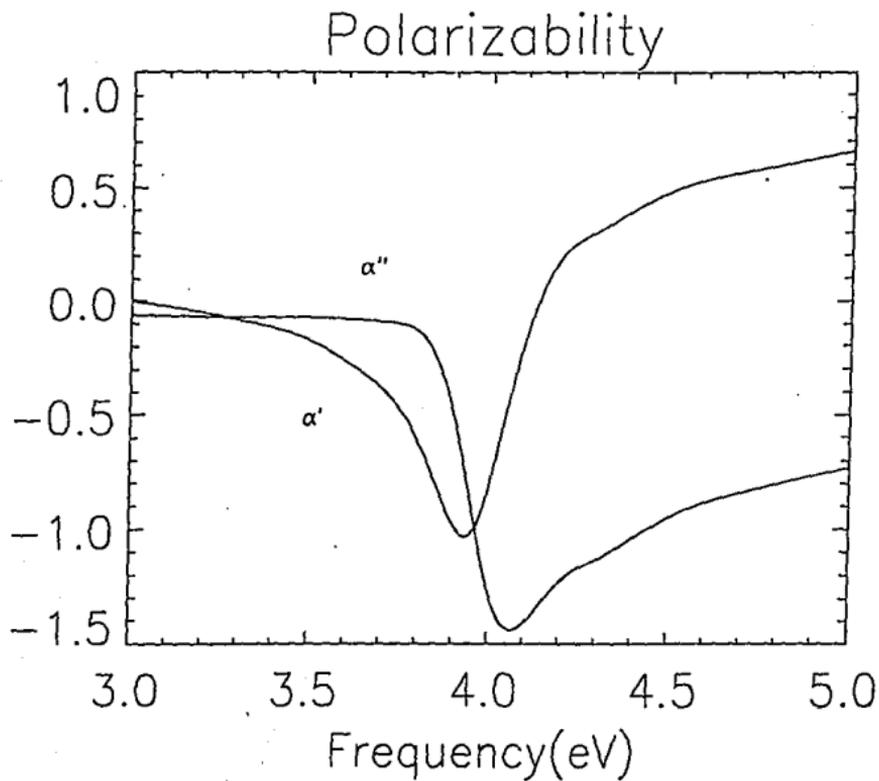


Fig. 6

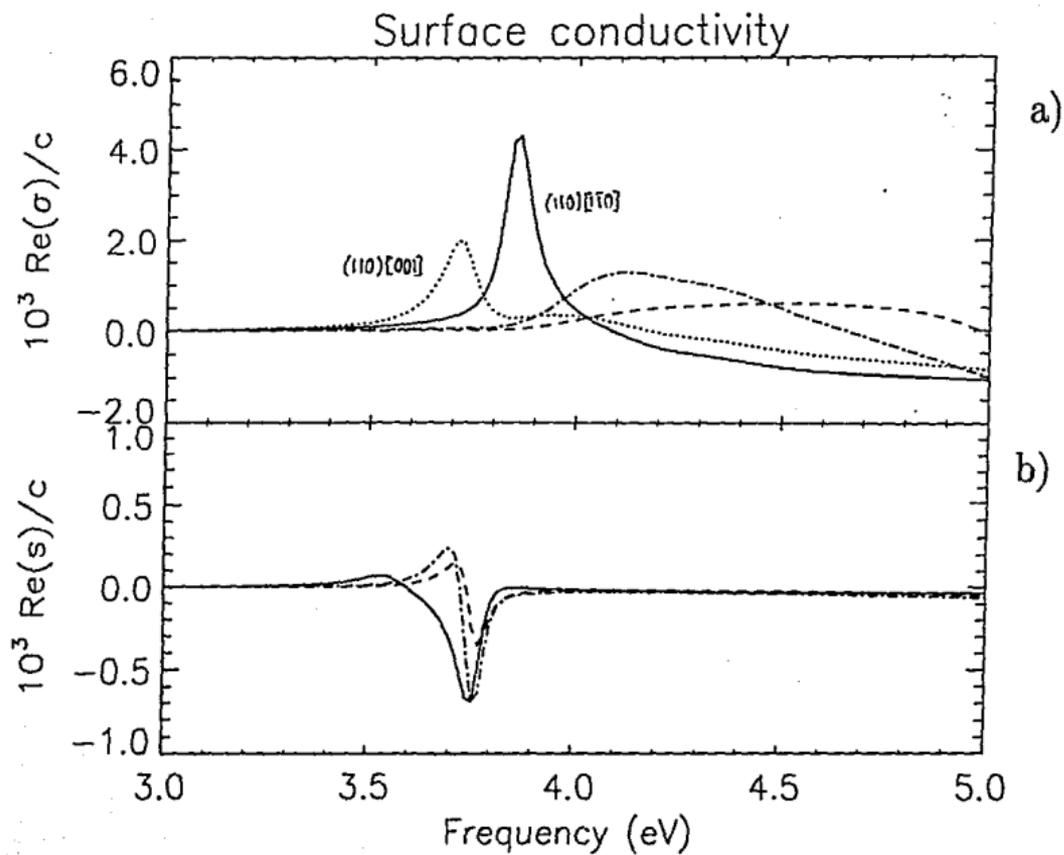


Fig. 7

Surface conductivity of Ag(110)

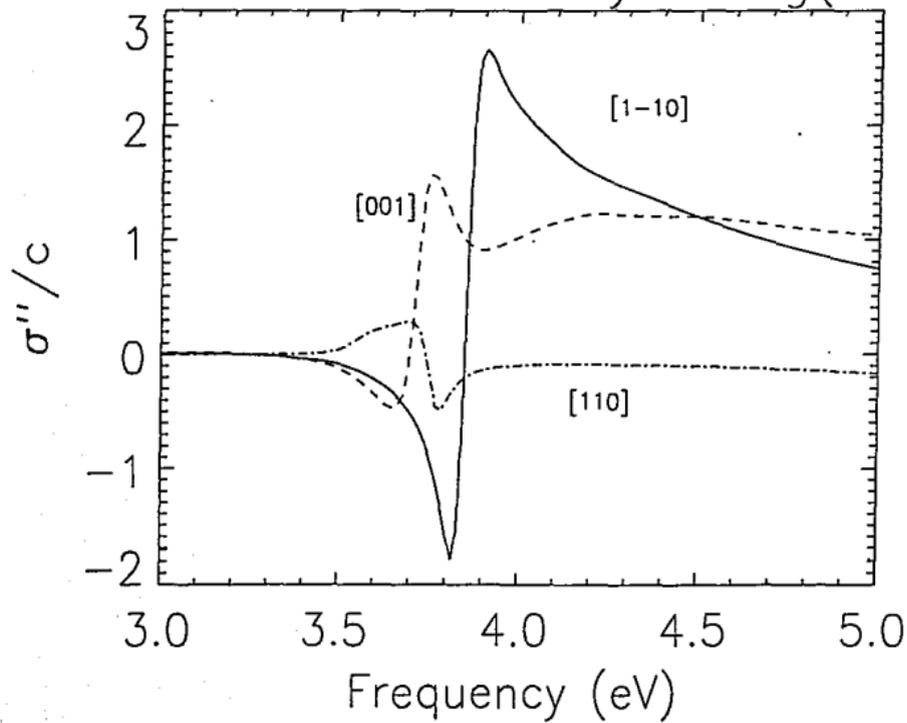


Fig. 8

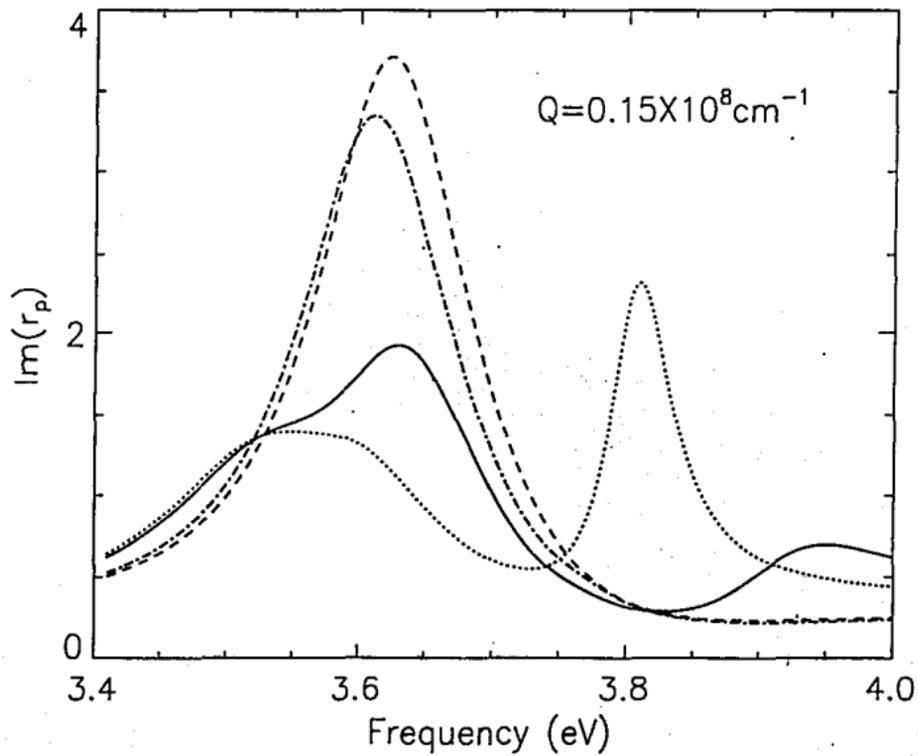


Fig. 9

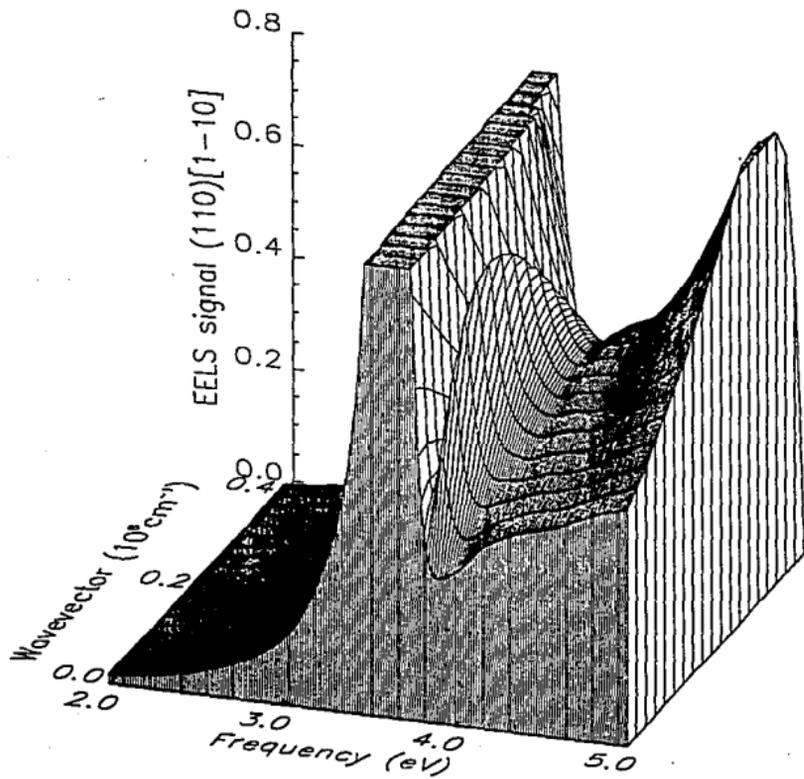


Fig. 10

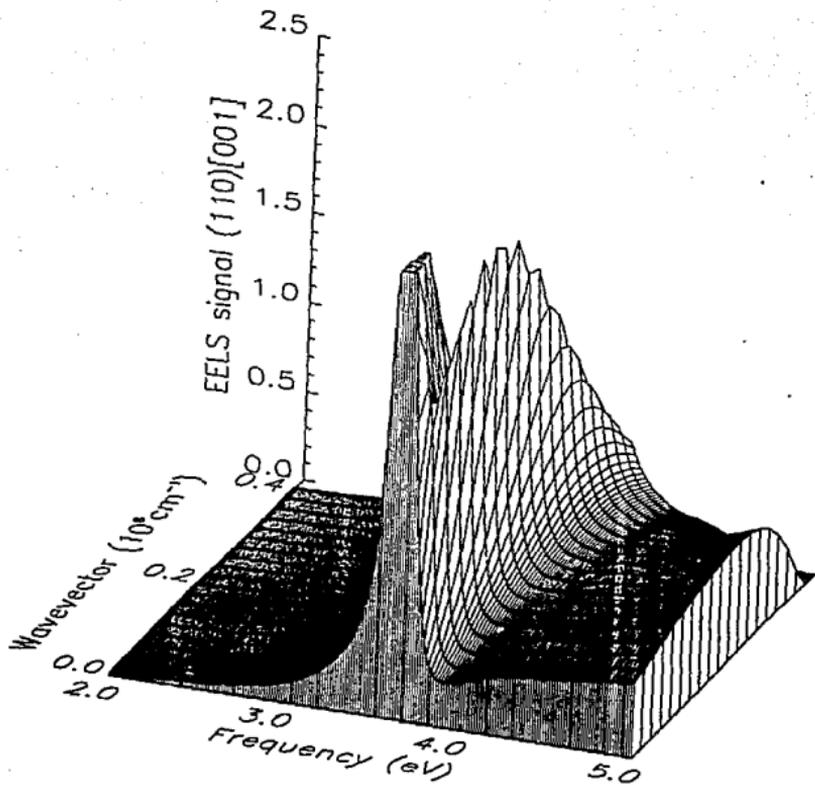


Fig. 11

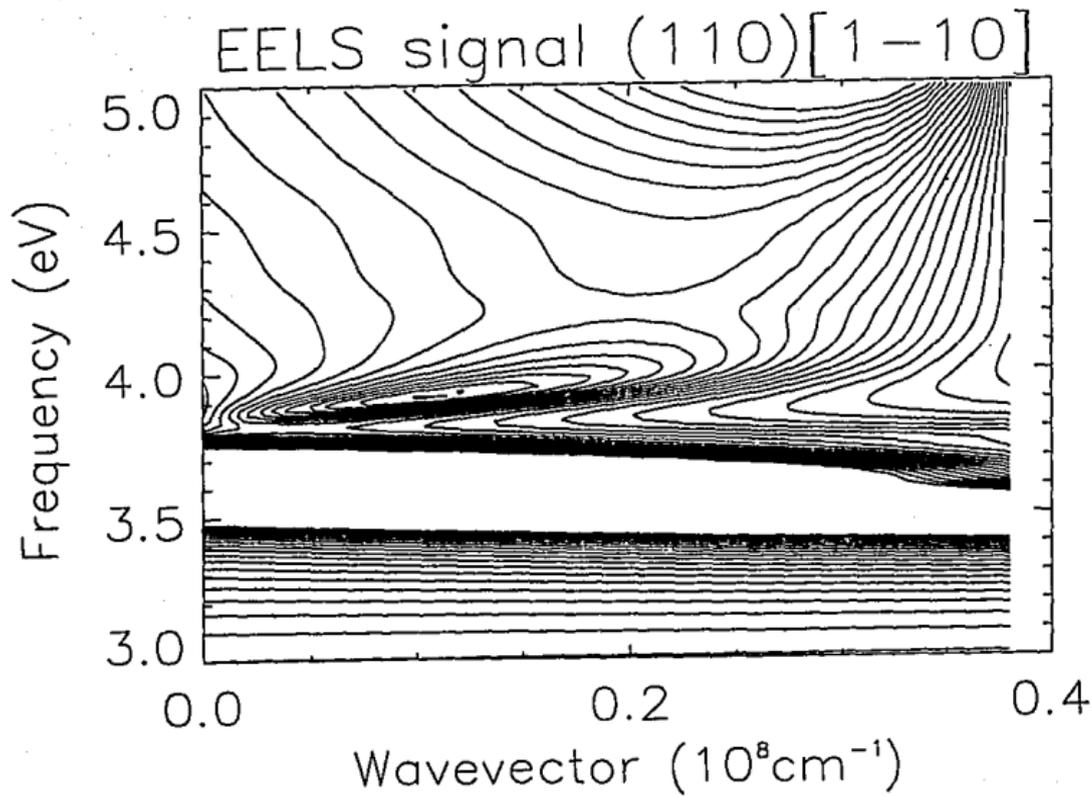


Fig. 12

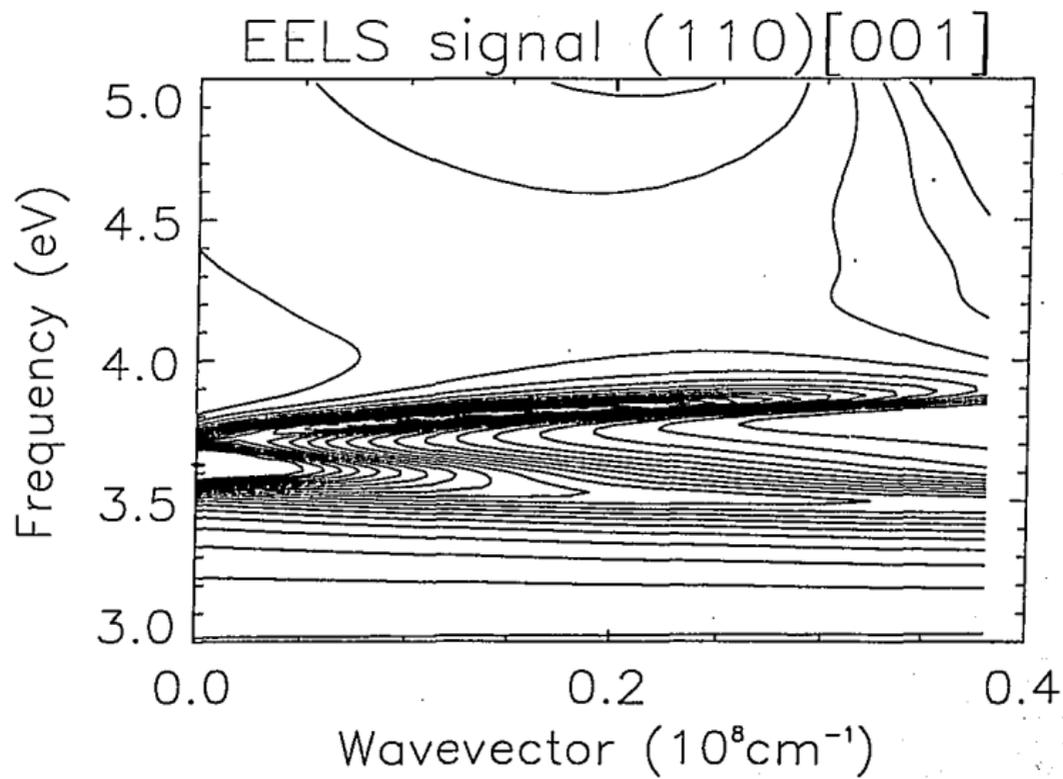


Fig. 13

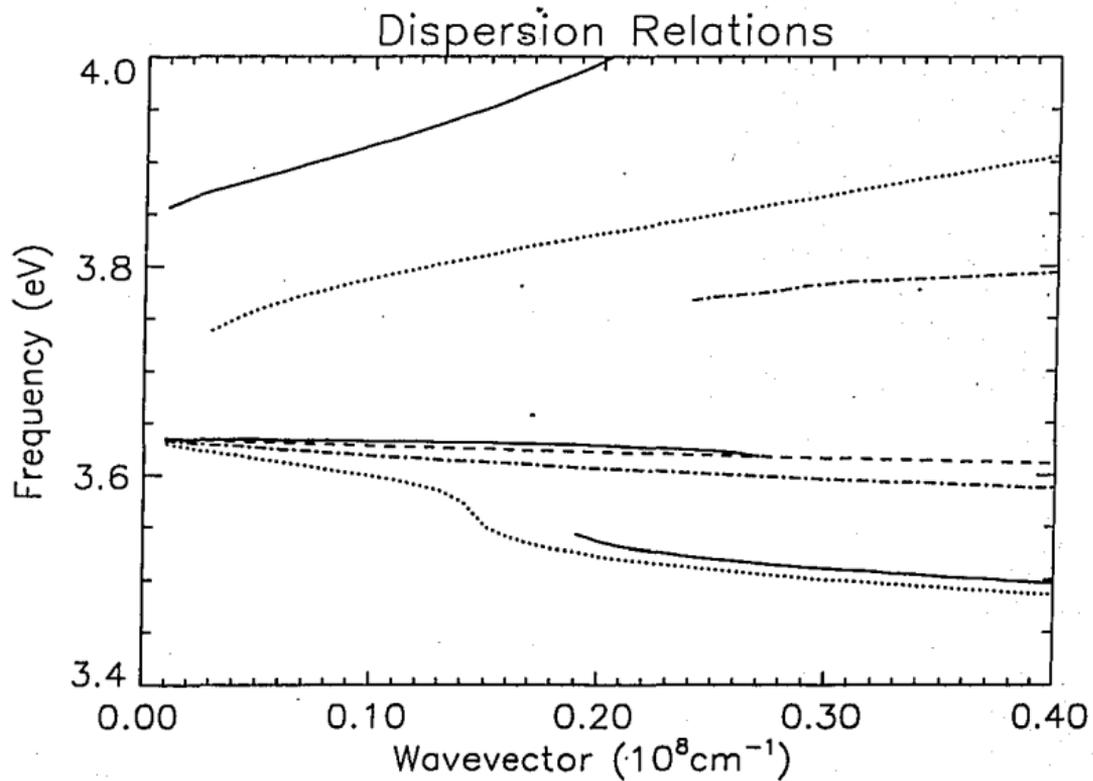


Fig. 14

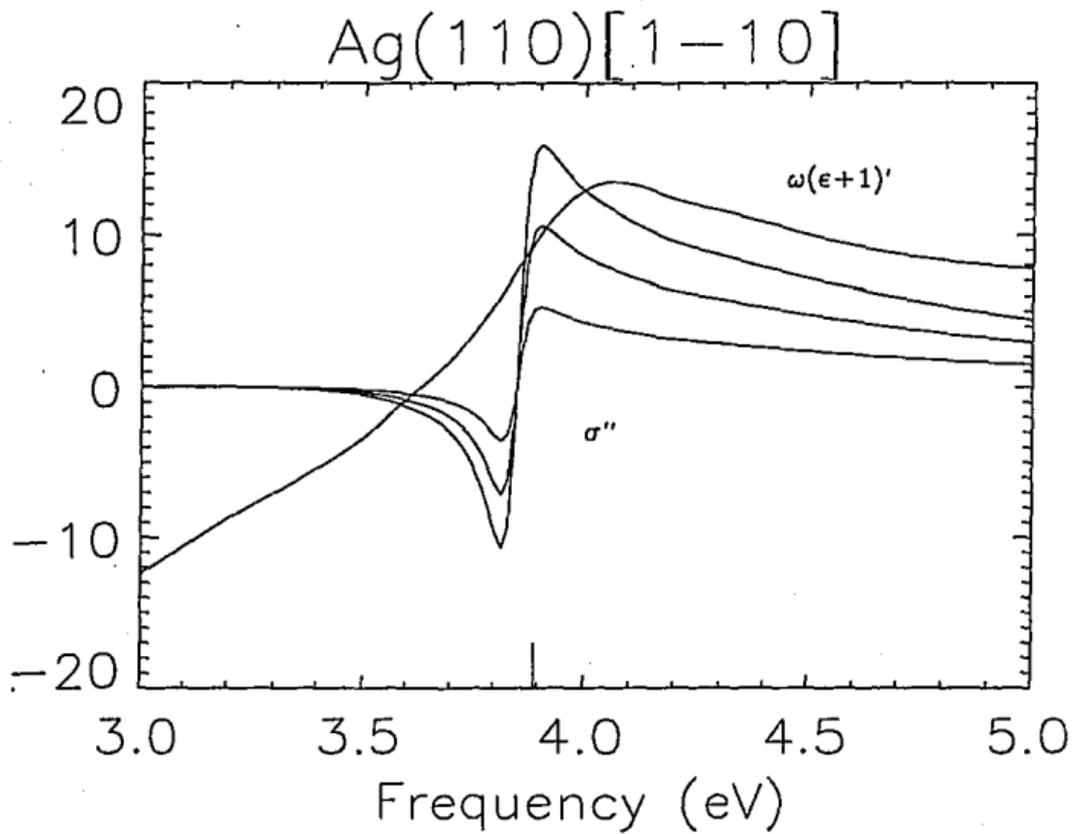


Fig. 15

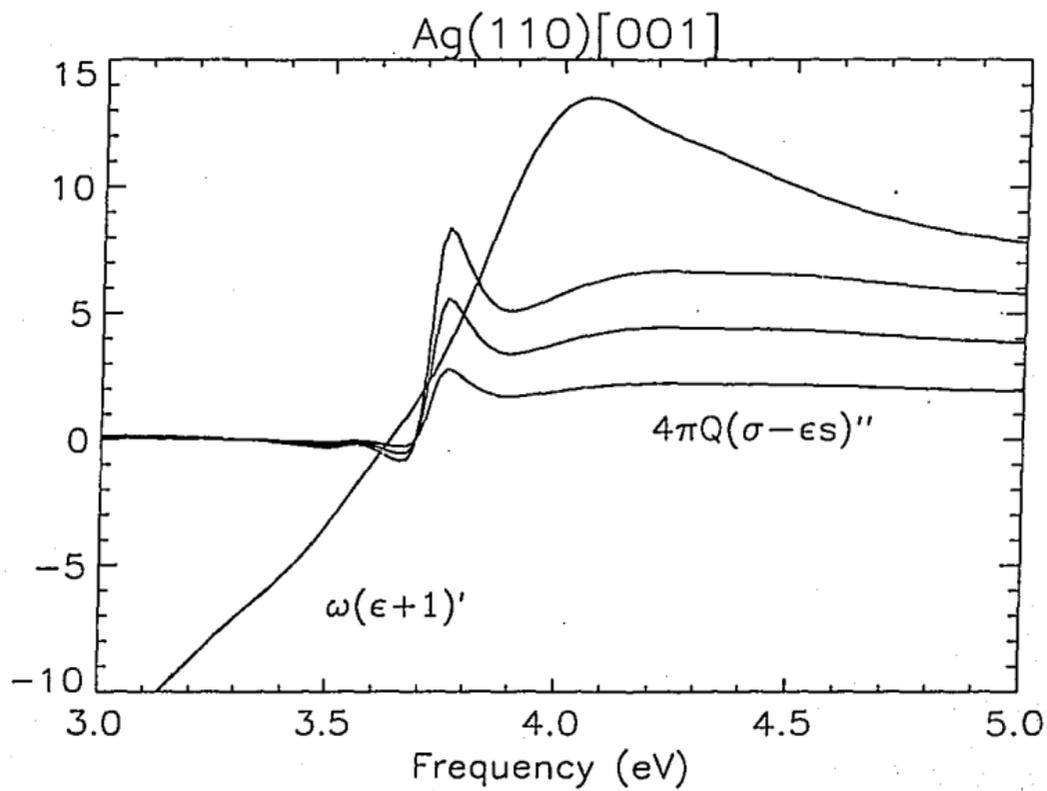


Fig. 16

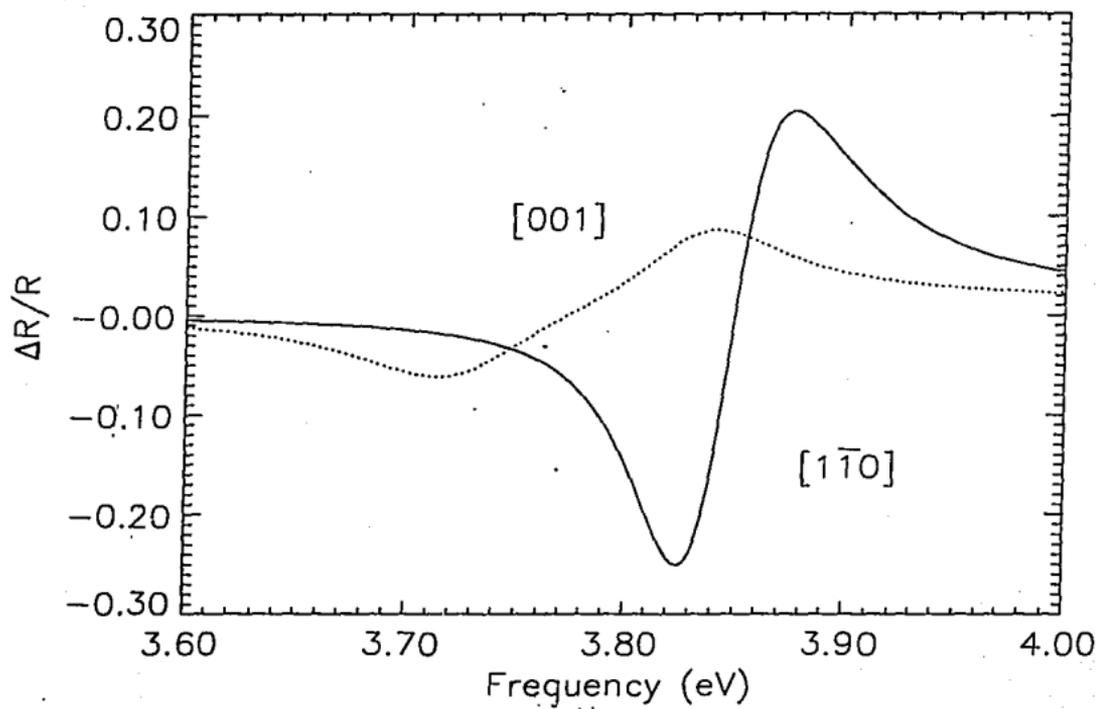
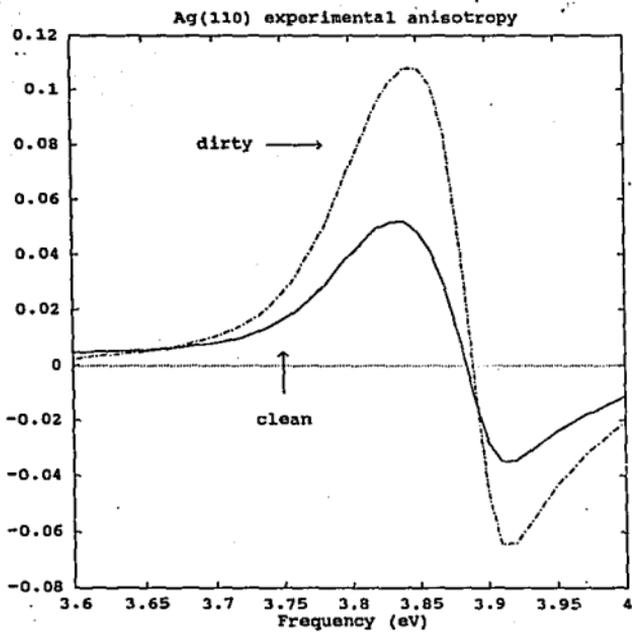


Fig. 17



PARTE II

VII Introducción. Parte II.

En la primera parte del presente trabajo se abordó el problema de los cambios que el efecto de campo local introduce en las propiedades ópticas de un metal cerca de su superficie. Desde una perspectiva general, el trabajo representa una contribución a los esfuerzos por entender la manera en que se modifica la respuesta electrónica de los materiales cuando se pierde la simetría traslacional en una de las direcciones cristalinas, y como relacionar dicha modificación con la respuesta en el interior. En el caso de los cristales de plata, se estudió el efecto del rompimiento de simetría sobre el campo electromagnético local que polariza las celdas unitarias del cristal en los primeros planos cristalinos, y no se consideraron los cambios que necesariamente sufre la estructura electrónica cerca de la superficie.

En la segunda parte de este trabajo consideramos el problema de la respuesta electrónica ante campos magnéticos externos de un sistema que consiste en un arreglo periódico de películas de materiales distintos, llamado superred. Al igual que en caso de las superficies metálicas, el estudio de las propiedades físicas de las superredes está íntimamente relacionado con el problema del rompimiento de la simetría traslacional del sistema. Sin embargo, en este caso nuestro interés está más enfocado al problema de cómo la geometría de la superred modifica las funciones de onda electrónicas respecto de las correspondientes a los materiales constituyentes, y cómo ello se refleja en la respuesta ante campos magnéticos externos y posibles ordenamientos magnéticos del sistema. Con este fin se construye un modelo de superred magnética que, incorporando la geometría básica de la superred, es lo suficientemente sencillo como para poder estudiar sus propiedades en detalle.

a Superredes Magnéticas.

Durante los últimos años, gracias al mejoramiento y sofisticación de las técnicas para el crecimiento controlado de películas delgadas de materiales cristalinos, ha sido posible obtener superredes de extraordinaria calidad. En las superredes se depositan películas bien definidas de diversos materiales, que forman una superestructura periódica cuyo periodo puede variar de entre unos cuantos planos cristalinos hasta el orden de cientos [27].

Particular interés han despertado las superredes magnéticas, superredes construidas a base de metales que en estado puro presentan algún tipo de orden magnético. Las propiedades magnéticas de dichas superredes muestran gran variedad, y proveen un escenario propicio para investigar aspectos fundamentales del magnetismo, así como de posibles aplicaciones tecnológicas. Ejemplos notables son superredes construidas a base de metales de transición ferromagnéticos como Fe, Co y Ni, en combinación con metales antiferromagnéticos como Cr, o de metales no magnéticos como Cu. También sobresalen superredes hechas a base de tierras raras como Dy, Gd y Tb.

b Superredes de Metales de Transición.

Los metales de transición ferromagnéticos como Fe, Co y Ni, tienen en común el carácter itinerante de los estados electrónicos responsables de sus propiedades magnéticas. En contraste con las tierras raras, los metales de transición muestran momentos magnéticos fraccionarios, y el magnetismo se debe a la interacción entre electrones en estados extendidos cerca del nivel de Fermi. La bandas $3d$ de los metales de transición magnéticos son demasiado anchas como para ser atribuibles a estados puramente atómicos, pero hay una

contribución importante a la energía que proviene de la fuerte repulsión coulombiana que experimentan los electrones que coinciden en una misma celda unitaria. Debido al principio de exclusión de Pauli la repulsión es más efectiva entre electrones de espín opuesto, por lo que puede resultar ventajoso para el sistema romper la degeneración de espín de manera de minimizar el traslape entre las funciones de onda de los electrones de espín diferente. Este es el caso de los metales de transición ferromagnéticos, en los cuales los electrones en las bandas $3d$ disminuyen la energía del sistema separándose en sub-bandas para las dos poblaciones de espín. La repoblación que se lleva a cabo da lugar a la magnetización neta.

En experimentos recientes [28] con superredes en las que metales de transición ferromagnéticos se intercalan con metales no magnéticos o antiferromagnéticos, se ha encontrado que las películas ferromagnéticas se acoplan ferromagnética o antiferromagnéticamente entre sí dependiendo del número de planos cristalinos del material que las separa. Típicamente, los experimentales reportan sus resultados en forma de gráficas de la energía de acoplamiento por unidad de área entre películas ferromagnéticas adyacentes como función de la distancia que las separa, gráficas en las que se aprecian oscilaciones que indican el paso de un tipo de acoplamiento a otro. Lo notable de dichas oscilaciones es que tienen componentes periódicas con periodos grandes (del orden 7 planos cristalinos) y que persisten aun cuando las películas ferromagnéticas están separadas por entre 40 y 100 planos cristalinos del material no magnético.

El acoplamiento oscilatorio a través de electrones de conducción es un fenómeno bien conocido en el contexto de las llamadas oscilaciones de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) [29]. Por oscilaciones RKKY se denotan usualmente las fluctuaciones en la densidad de espín inducidas cuando electrones de conducción interactúan con momentos

magnéticos localizados, como en el caso de impurezas magnéticas en un metal paramagnético, o las mismas tierras raras consideradas más adelante. Dichas oscilaciones están íntimamente relacionadas con singularidades en la respuesta de los electrones de conducción debido a transiciones entre estados en la superficie de Fermi.

En el caso de un gas de electrones homogéneo, el periodo de dichas oscilaciones es muy chico ($\approx \pi/k_{Fermi}$) y su alcance relativamente corto para dar cuenta por sí solas de las oscilaciones de largo alcance arriba mencionadas. Esto indica que para entender los experimentos es indispensable considerar la forma en que la geometría de la superred afecta a las funciones de onda electrónicas de los materiales homogéneos.

Aunque se han realizado cálculos *ab initio* en algunos casos, éstos son posibles sólo para celdas de la superred muy pequeñas, y de tal sofisticación que oscurecen los mecanismos físicos subyacentes [30]. Descripciones más heurísticas [31] se basan en la idea de que, debido a la simetría de la superred, la superficie de Fermi de los materiales constituyentes se "dobla" en sí misma repetidas veces en la "mini-zona" de Brillouin de la superred ("Folding"), dando lugar a transiciones entre estados separados con vectores de onda pequeños que de otra manera no se darían. Los resultados indican que en el acomplamiento intervienen electrones itinerantes en estados coherentes de la superred, que establecen cierto tipo de interacción de intercambio de largo alcance, cuyo origen último es la hibridización entre los estados electrónicos de las bandas de los materiales constituyentes.

c Superredes con tierras raras.

En contraste con los metales de transición, en las tierras raras se tienen momentos magnéticos localizados en los iones, que corresponden a vacancias en los orbitales atómicos

4f [32]. Las tierras raras son en cierta forma el análogo magnético de los metales nobles, con una red de iones localizados entre los que se mueven los electrones de conducción. El traslape de orbitales 4f de átomos vecinos es despreciable, y los electrones en dichos orbitales están literalmente atrapados a sus respectivos átomos. Sin embargo, los momentos magnéticos en diferentes sitios de la red se acoplan entre sí a través de los electrones de conducción de las bandas 5d y 6s, y se piensa que entre los momentos localizados se establece una interacción de intercambio indirecto del tipo RKKY. Esta interacción es de carácter oscilatorio, y está en gran medida determinada por la susceptibilidad magnética $\chi(Q)$ de los electrones de conducción. Las tierras raras presentan una variedad muy rica de estructuras magnéticas, que incluye ondas de espín helicoidales, longitudinales, y cónicas [32].

Los ordenamientos magnéticos periódicos en las tierras raras Tb, Dy, Ho, Er y Tm están íntimamente relacionados con la geometría de sus superficies de Fermi. En las superficies de Fermi de las tierras raras magnéticas se encuentran regiones casi planas paralelas entre sí, conectadas por una traslación simple en el espacio de momentos, fenómeno que se conoce como "anidamiento" [34]. El anidamiento entre estados en la superficie de Fermi da contribuciones importantes a la respuesta de los electrones de conducción, y el ordenamiento magnético debajo de la temperatura de Neel esta modulado por el vector de onda que conecta dichos estados.

Considérese por ejemplo el caso del Dy. El Dy tiene una configuración $[Xe]4f^{10}5d^06s^2$, y cristaliza en una estructura hexagonal compacta (hcp) con $a = 3.593 \text{ \AA}$ para el plano basal, y $c = 5.655 \text{ \AA}$. Las bandas d y s se hibridizan y dan lugar a una superficie de Fermi de forma intrincada. A la temperatura de Neel (178K) se forma en el Dy una onda de

espín helicoidal con eje a lo largo del eje c , en la que los momentos magnéticos residen en los planos basales, y rotan cierto ángulo al pasar de un plano basal a otro. El periodo de la hélice aumenta de $\simeq 25 \text{ \AA}$ a la temperatura de Neel, hasta $\simeq 40 \text{ \AA}$ a $T = 85 \text{ K}$, temperatura a la que se da una transición de primer orden a un estado ferromagnético simple. Cálculos de la susceptibilidad $\chi(Q)$ usando la estructura de bandas calculada para el Dy muestran un máximo bien definido al vector de onda de la onda helicoidal [35].

Superredes magnéticas contruidas a base de tierras raras muestran propiedades magnéticas muy ricas. En superredes formadas con Gd/Dy, por ejemplo, la magnetización total como función de la temperatura pasa por varios máximos y mínimos, que se piensa indican sucesivos reordenamientos de los espines conforme se enfría al sistema [36]. Gran interés han despertado también superredes de tierras raras combinadas con Y [46]. Aunque el Y es un metal no magnético, se inducen en sus electrones de conducción oscilaciones de RKKY de amplitud y alcance inusuales cuando entran en contacto con momentos magnéticos localizados. Experimentos de difracción de neutrones revelan que en superredes de Dy/Y, Er/Y, Gd/Y y Ho/Y, se forman ondas de espín en el Y que acoplan las películas magnéticas a través de espesores de hasta 120 \AA .

d Modelos Unidimensionales.

Dado que en este trabajo utilizaremos un modelo unidimensional para describir nuestra superred magnética, consideramos conveniente hacer una breve revisión del uso de modelos unidimensionales en el contexto de la física del estado sólido.

Los modelos unidimensionales han sido objeto de extensos estudios [37]. Existen al menos dos razones de carácter práctico para ello:

1) Su simplicidad relativa, que permite resolver problemas que en más de un dimension resultaría muy difícil o imposible.

2) Su utilidad como campo de prueba de métodos aproximados que pueden aplicarse posteriormente a problemas de mayor dimensionalidad.

Sin embargo, la importancia del estudio de modelos unidimensionales va más allá de lo anterior. Por un lado, en los últimos años la síntesis experimental de materiales de baja dimensionalidad ha alcanzado una gran sofisticación, de modo que actualmente es posible estudiar sistemas unidimensionales o quasi-unidimensionales reales [38] [39] [40]. Por otro lado, el estudio de ciertos problemas unidimensionales ha sido el punto de partida de teorías que a la postre han resultado muy fructíferas. Esto se debe en parte a que los modelos unidimensionales tienen una simplicidad conceptual y transparencia física que permite un acercamiento intuitivo a conceptos que, una vez asimilados, pueden ser generalizados a sistemas en más dimensiones.

Un ejemplo importante de lo anterior, y que está íntimamente relacionado con el tema del presente trabajo, es el de sistemas electrónicos conductores que debajo de cierta temperatura crítica sufren una transición espontánea que abre una brecha de energía en el nivel de Fermi.

Tal es el caso de sistemas que presentan en sus estado base una Ondas de Densidad de Carga (ODC), conceptualizadas por primera vez por Peierls en 1930 [42]. Peierls consideró una cadena unidimensional de iones con electrones moviéndose a lo largo de ella. Debajo de cierta temperatura, al sistema le es energéticamente más favorable formar un onda de densidad de carga con modulación de dos veces el vector de onda de Fermi ($2k_F$). Las transiciones de Peierls han sido detectadas experimentalmente y de hecho han sido objeto

de extensos estudios en la literatura [43].

Otro ejemplo es el clásico artículo de H. Frölich [44], en uno de los intentos más notables por entender el fenómeno de la superconductividad anteriores al advenimiento de la teoría BCS [45]. Frölich considera electrones libres moviéndose en una cadena unidimensional de iones. Los electrones interactúan con los desplazamientos de la red de iones, y debajo de cierta temperatura el sistema sufre una transición análoga a la de Peierls, en la que tanto la densidad electrónica como la cadena de iones sufren una distorsión con modulación $2K_F$ que abre una brecha en el nivel de Fermi.

En condiciones normales, una transición de Peierls es una transición conductor-aislante. Sin embargo, Frölich considera el caso en que la longitud de la ODC que se forma es incommensurable respecto al parámetro de la red de iones unidimensional. La incommensurabilidad de la ODC hace que ésta no se fije en un punto determinado respecto a la red de iones, lo que a su vez permite que los electrones se muevan libremente a lo largo de la cadena. Debido a la brecha que la ODC produce en el espectro de energía de los electrones, éstos son inmunes a los procesos normales de dispersión elástica por impurezas, y Frölich concluye que un sistema tal tendría propiedades superconductoras. Naturalmente, el mismo Frölich reconoce que una descripción correcta del fenómeno de la superconductividad debe ser necesariamente tridimensional si va a incluir el efecto Meissner, pero la idea de electrones moviéndose libremente con una brecha en su espectro de energías representó una contribución conceptual importante que de hecho es retomada posteriormente por la teoría BCS. En la teoría BCS la brecha no es producida por un ordenamiento en espacio real, sino más bien en el espacio de momentos.

Un tercer ejemplo lo constituye el caso de las Ondas de Densidad de Espín (ODE).

Aunque fue Slater [41] el primero en considerar la posibilidad de su existencia, fue sin lugar a dudas Overhauser quien las popularizó [54][55]. Sobre las ODE nos extendemos más adelante debido a su importancia en el contexto del presente trabajo. Aquí nos limitaremos a resaltar que en el primer artículo en el que Overhauser abordó el problema de las ODE, se presenta la versión unidimensional del problema [54]. Aunque dos años después publica la versión tridimensional [55], es significativo el hecho de que haya preferido preparar a sus lectores presentando, primero, el caso unidimensional.

e Superred Magnética Modelo.

Como mencionamos anteriormente, la aplicación a superredes de las técnicas *ab initio* usadas tradicionalmente para el caso de cristales homogéneos presenta gran dificultad [30]. Esto ha motivado el desarrollo de modelos simplificados como una alternativa que permite avanzar en el entendimiento de los efectos novedosos encontrados en experimentos que involucran superredes, sin una relación obvia con las propiedades físicas de los materiales constituyentes.

Como ejemplo de esto, en el contexto de las superredes magnéticas, resalta el trabajo de Camley *et al* [36]. Camley considera el caso de una cadena unidimensional de momentos magnéticos localizados, descrita por una hamiltoniano del tipo de Heisenberg con acoplamiento a primeros y segundos vecinos. Cada material constituyente está caracterizado por los valores de sus constantes de acoplamiento, las que determinan el que se establezca en configuraciones ferromagnéticas, antiferromagnéticas, o helicoidales. Al alternar materiales con diferentes constantes de acoplamiento y jugar con los grosores, Camley *et al* encuentran una variedad muy rica de posibles ordenamientos magnéticos.

Una desventaja del modelo de Camley es que de entrada parte de un sistema de momentos totalmente localizados, por lo que no hay forma de incluir efectos provenientes del carácter itinerante de los electrones de conducción en los metales magnéticos. Debido a ello, el modelo no permite considerar la posibilidad de acoplamiento RKYY, ni simular materiales cuyo estado base presenta una ODE. En la aproximación de Hartree-Fock, un gas de electrones unidimensional es inestable respecto a la formación de una Onda de Densidad de Espín (ODE) con vector de onda $2K_F$, con K_F el vector de onda de Fermi [54] [47]. Asociada a dicha inestabilidad, se tiene una singularidad en la susceptibilidad de espín $\chi(Q)$, que diverge logarítmicamente a $Q \simeq 2K_F$ conforme el sistema pasa por la temperatura de transición.

Una forma conveniente de introducir los efectos de la itinerancia electrónica en las propiedades magnéticas de metales magnéticos se debe a Hubbard [49]. Hubbard considera una red discreta con electrones saltando entre sitios con cierta amplitud de probabilidad de salto τ . La interacción electrónica entra en el modelo de Hubbard mediante un término que involucra un parámetro U , que es una medida de la repulsión que dos electrones de espín opuesto sienten cuando coinciden en el mismo sitio. La competencia entre el término de energía cinética y el término de interacción determina la temperatura de transición y la naturaleza del estado base del sistema.

La idea de estudiar las propiedades magnéticas de una superred formada por cadenas unidimensionales de Hubbard fue usada por Falicov *et al* para estudiar el efecto de intercalar materiales ferromagnéticos con materiales antiferromagnéticos o paramagnéticos en un modelo itinerante [26]. Sin embargo, el cálculo que presentan los autores se limita al caso en que la superred se encuentra a temperatura cero, y no abordan el problema

del comportamiento del sistema conforme es enfriado y pasa por la temperatura de transición. Además, los autores se limitan al caso en que los materiales constituyentes presenta ordenamientos simples, y no consideran la muy interesante posibilidad de que los materiales por separado tiendan a formar ondas de densidad de espín moduladas por periodos inconmensurables con el periodo de la superred.

El modelo que presentamos en este trabajo resuelve dichas carencias, y permite hacer un estudio detallado de la dependencia con la temperatura de las propiedades magnéticas de la superred.

Nuestro modelo consiste en una superred construida con dos "metales" unidimensionales de Hubbard A y B , cada uno de los cuales presenta en su estado puro una ODE con vectores de onda $2K_F^{(A)}$ y $2K_F^{(B)}$ respectivamente. En la aproximación de campo medio, y mediante una descripción del tipo RPA para la susceptibilidad estática de espín, investigamos la naturaleza del ordenamiento de espín y respuesta magnética como función de la temperatura. Los parámetros del modelo son N_A, N_B , el número de átomos de material A y B respectivamente, y ρ_A, ρ_B , sus respectivas densidades electrónicas promedio por sitio, y que determinan los valores $2K_F^{(A)}, 2K_F^{(B)}$.

Si nuestro interés fuese literalmente el estudio de estructuras unidimensionales, el uso de la aproximación de Campo Medio y RPA resulta cuestionable. En una dimensión las fluctuaciones rompen el orden de largo alcance predicho por las teorías de Campo Medio. Sin embargo, estamos interesados en describir, al menos cualitativamente, materiales tridimensionales cuya superficie de Fermi es tal que en el estado base presenta una ODE. Como ya mencionamos arriba, en tales materiales la formación de la onda de espín está asociada a transiciones entre estados que pertenecen a planos casi paralelos de la superficie de Fermi,

y que dan lugar a una divergencia logarítmica en la susceptibilidad, análoga a la del caso unidimensional [50]. Aunque procedemos con dicha analogía en mente, creemos que el modelo es interesante por sí mismo, pues permite un acercamiento sencillo e intuitivo a los mecanismos involucrados en las transiciones de fase en superredes magnéticas.

En la Sección VIII consideramos el caso homogéneo. En la Sección IX derivamos las expresiones pertinentes para nuestra Superred modelo, y en la Sección X presentamos y discutimos los resultados obtenidos. En la Sección XI generalizamos la teoría para incluir la posibilidad de ondas helicoidales. Finalmente, dedicamos la sección XII a las conclusiones.

VIII Teoría del Campo Medio de Ondas de Densidad de Espín. Caso homogéneo.

En esta sección consideramos un modelo sencillo de un sistema que presenta un ODE debajo de cierta temperatura crítica T_c . El tratamiento que se presenta es una adaptación del formalismo utilizado por Mills, Levin, y Cunningham para investigar la competencia entre el apareamiento BCS y la distorsión de Peierls para una sistema unidimensional [53]. Los autores consideran una red unidimensional de iones con electrones moviéndose entre sitios. El hamiltoniano contiene dos términos de interacción, uno atractivo que favorece la transición a un estado superconductor, y un término repulsivo que favorece una transición de Peierls. Los autores utilizan una teoría de campo medio análoga a la presentada en el presente trabajo.

Nuestro modelo considera electrones moviéndose en un red unidimensional de sitios discretos, en cada uno de los cuales reside un estado atómico. El sistema está descrito por el Hamiltoniano de Hubbard unidimensional [49], que en segunda cuantización es

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + U \sum_{l=1}^N \eta_l \eta_l, \quad (50)$$

con N sitios que enumeramos con el índice l sobre los cuales se imponen condiciones de contorno periódicas. El operador $c_{k\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger)$ aniquila (crea) un electrón en el estado de onda plana con vector de onda k , energía ε_k , y espín σ . En el último término $\eta_l = c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma}$ es el operador de número, donde $c_{l\sigma} (c_{l\sigma}^\dagger)$ aniquila (crea) un electrón de espín σ en el sitio l ésimo, y tiene la expansión

$$c_{l\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{k\sigma} e^{ikl}. \quad (51)$$

donde por simplicidad y sin pérdida de generalidad tomamos la separación entre sitios como

unidad. Las relaciones de anticonmutación apropiadas para fermiones son

$$\{c_{l\sigma}^\dagger, c_{l'\sigma'}\} = c_{l\sigma}^\dagger c_{l'\sigma'} + c_{l'\sigma'} c_{l\sigma}^\dagger = \delta_{l,l',\sigma,\sigma'} \quad (52)$$

$$\{c_{l\sigma}, c_{l'\sigma'}\} = 0. \quad (53)$$

Dos electrones del mismo espín no pueden coincidir en el mismo átomo. Cuando electrones de espín opuesto coexisten en un sitio, se repelen debido a su interacción coulombiana. El último término en (50) toma en cuenta dicho efecto, con U un parámetro que en principio se obtendría a partir de expresiones para el valor esperado del potencial coulombiano en los orbitales atómicos. La interacción se toma como de corto alcance, de modo que electrones en diferentes sitios no interactúan entre sí.

El problema se divide de manera natural en dos partes, dependiendo de si estamos por arriba o por debajo de la temperatura a la que se dá el ordenamiento magnético (T_c). A continuación pasamos discutir los dos casos dentro de la aproximación de campo medio.

a $T > T_c$.

Arriba de la temperatura crítica la magnetización promedio es cero en ausencia de campo externo, de modo que la densidad electrónica es uniforme e idéntica para cada espín. Nuestro interés reside en obtener un criterio de estabilidad para la fase paramagnética, para lo cual consideramos la respuesta del sistema a un campo magnético externo h_l sinusoidal y estático que se acopla con el espín. En presencia del campo,

$$H = \sum_k \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + U \sum_l \eta_{l\uparrow} \eta_{l\downarrow} - \sum_l (\eta_{l\uparrow} - \eta_{l\downarrow}) h_l, \quad (54)$$

donde escogemos las unidades de manera que el magnetón de Bohr $\mu_B = 1$. Conviene expresar el Hamiltoniano (54) en término de los operadores de densidad de espín y densidad

total por sitio,

$$s_l = \frac{1}{2}[\eta_l - \eta_{l1}] \quad (55)$$

$$n_l = \frac{1}{2}[\eta_l + \eta_{l1}], \quad (56)$$

en término de los cuales

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + U \sum_l [n_l^2 - s_l^2] - 2 \sum_l s_l h_l. \quad (57)$$

En la aproximación de campo medio reescribimos el operador de espín s_l como

$$s_l = \langle s_l \rangle + (s_l - \langle s_l \rangle), \quad (58)$$

e ignoramos en H términos cuadráticos en el término entre paréntesis. Luego, en dicha aproximación

$$H_{MF} = \sum_k \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + U \sum_l [n_l^2 + \langle s_l \rangle^2] - 2 \sum_l [h_l + U \langle s_l \rangle] s_l \quad (59)$$

El segundo término se puede ignorar a menos que estemos interesados en la energía total del sistema.

En el Hamiltoniano (59) suponemos que el campo externo h_l actúa como una pequeña perturbación, de modo que la respuesta del sistema al mismo se puede asumir lineal. Además, dado que el sistema es homogéneo, la respuesta en un punto l al valor del campo en otro punto l' depende sólo de la distancia entre dichos puntos, de forma que en general $\langle s_l \rangle$ y h_l están conectados por un ecuación constitutiva de la forma

$$\langle s_l \rangle = \sum_{l'} \chi(l-l') h_{l'}, \quad (60)$$

que define la susceptibilidad total de espín en espacio real $\chi(l-l')$. Considérese ahora un campo de la forma $h_l = h(Q)e^{iQl} + \text{c.c.}$, con $-\pi < Q < \pi$ y c.c. indica el complejo

conjugado del término precedente. Es fácil mostrar que la transformada de Fourier de la susceptibilidad de espín

$$\chi(Q) = \frac{1}{N} \sum_l \chi(l-l') e^{-iQ(l-l')} \quad (61)$$

es tal que

$$s(Q) = \chi(Q)h(Q), \quad (62)$$

con $\langle s_l \rangle = s(Q)e^{iQl} + \text{c.c.}$ Para calcular $\chi(Q)$ en la aproximación de campo medio, notamos que en el Hamiltoniano (59), el tercer término describe electrones no interactuantes sujetos a un campo efectivo $h_l^{ef} = h_l + U \langle s_l \rangle$. Definimos entonces la susceptibilidad de electrón libre $\chi^o(Q)$, definida en término de la respuesta al campo h_l^{ef} como

$$\chi^o(Q) = \frac{s(Q)}{h^{ef}(Q)}. \quad (63)$$

De (62) y (63) sigue que

$$\chi(Q) = \frac{\chi^o(Q)}{1 - U\chi^o(Q)}. \quad (64)$$

De aquí es inmediato que la fase paramagnética será estable si y sólo si, para toda Q , $U\chi^o(Q) < 1$, y la transición a la fase magnética ocurre cuando para alguna Q ,

$$\chi^o(Q) = \frac{1}{U}. \quad (65)$$

Aunque en este trabajo no consideramos aspectos dinámicos de la respuesta magnética, no está de más mencionar que la relación anterior, generalizada para frecuencias arbitrarias, lleva a la relación de dispersión para las ondas de espín o magnones. Es claro que en general, diferentes Q 's tendrán asociadas diferentes temperaturas a las que (65) se cumple. La temperatura crítica es la máxima de dichas temperaturas, y la Q asociada determina la longitud de onda de la ODE que se forma al enfriar el sistema debajo del punto de

transición. Usando teoría de perturbaciones [51] se puede obtener de manera directa la siguiente expresión para $\chi^{(0)}(Q)$:

$$\chi^{(0)}(Q) = \frac{1}{N} \sum_k \left(\frac{f_{k+Q} - f_k}{\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}} \right), \quad (66)$$

donde $f_k = f(\epsilon_k)$ es la función de distribución de Fermi. Entonces la condición

$$\frac{1}{N} \sum_k \left(\frac{f_{k+Q} - f_k}{\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}} \right) = \frac{1}{U} \quad (67)$$

determina la temperatura crítica.

La suma del lado izquierdo de la ec.(67) tiene una importante contribución de los términos para los cuales $\epsilon_k \simeq \epsilon_{k+Q}$. Conforme la temperatura se reduce, el principio de exclusión restringe dichos términos a un intervalo de orden $\simeq k_B T$ alrededor del nivel de Fermi, y las transiciones $-K_F \iff K_F$ dominan con términos que divergen, a $T = 0^\circ K$, como las derivadas de la función de Fermi. Para el caso de electrones independientes en una banda de la forma $\epsilon(k) = 2\tau(1 - \cos(k))$, obtenemos, en el límite en que $N \rightarrow \infty, T \rightarrow 0$,

$$\begin{aligned} \chi^{(0)}(Q) &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{4\pi\tau} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{f_{k+Q} - f_k}{\cos(k) - \cos(k+Q)} \\ &= \frac{1}{4\pi\tau \sin(Q/2)} \log \left(\frac{|\sin(Q/2) + \sin(K_F)|}{|\sin(Q/2) - \sin(K_F)|} \right), \end{aligned} \quad (68)$$

donde claramente se aprecia una divergencia logarítmica en la respuesta para $Q = 2K_F$.

Divergencias en la respuesta de un sistema debido a transiciones entre grupos de estados en la superficie de Fermi, dan lugar a reordenamientos que abren brechas que remueven dichos estados de la misma, y se habla de un fenómeno de "anidamiento" (nesting) [34]. Tales efectos son más dramáticos en, pero no exclusivos de, sistemas unidimensionales. Por ejemplo, Overhauser [55] demostró que en tres dimensiones, un gas de electrones con interacción coulombiana no apantallada es inestable, en la aproximación de Hartree-Fock,

a la formación de una ODE. Estudios posteriores sugieren que la inclusión de efectos de correlación y apantallamiento suprimen dicha inestabilidad [56]. Sin embargo, tal como discutimos en la introducción, efectos de anidamiento se pueden dar en materiales en los que porciones de la superficie de Fermi se pueden superponer mediante una simple traslación en el espacio de momentos. Naturalmente, en tales casos la superficie de Fermi se asemeja poco a la superficie de Fermi de un gas de electrones homogéneo.

b $T < T_c$.

En la figura {1} mostramos gráficas del inverso de la χ^o paramagnética para diferentes llenados y temperaturas. En cada gráfica, la ordenada del mínimo de $[\chi^o(Q)]^{-1}$ determina la mínima U que hace la fase no magnética inestable a la temperatura dada. Conforme la temperatura disminuye, el vector de onda al que se dá dicho mínimo se define claramente a $Q = 2K_F$. Debajo de la temperatura crítica, se forma en el sistema algún tipo de orden magnético.

Para tratar este caso volvemos al hamiltoniano (50) en ausencia de campo externo, y hacemos la aproximación de campo medio directamente sobre los operadores de densidad para cada espín. Escribiendo

$$\begin{aligned} \eta_{1\uparrow} &= \langle \eta_{1\uparrow} \rangle + (\eta_{1\uparrow} - \langle \eta_{1\uparrow} \rangle) \\ \eta_{1\downarrow} &= \langle \eta_{1\downarrow} \rangle + (\eta_{1\downarrow} - \langle \eta_{1\downarrow} \rangle), \end{aligned} \quad (69)$$

e ignorando en $\eta_{1\uparrow}\eta_{1\downarrow}$ términos cuadráticos en las fluctuaciones alrededor de los promedios, obtenemos

$$H_{MF} = \sum_k \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + U \sum_l \langle \eta_{1\uparrow} \rangle \eta_{1\uparrow} + \langle \eta_{1\downarrow} \rangle \eta_{1\downarrow} - \langle \eta_{1\uparrow} \rangle \langle \eta_{1\downarrow} \rangle. \quad (70)$$

Estamos interesados en soluciones autoconsistentes en las que el sistema presenta un onda sinusoidal de densidad de espín. Luego, suponemos que las densidades promedio se pueden escribir como

$$\langle \eta_{l1} \rangle = \bar{n} + \Delta_1 \cos(Ql + \phi_1) \quad (71)$$

$$\langle \eta_{li} \rangle = \bar{n} + \Delta_1 \cos(Ql + \phi_1), \quad (72)$$

donde Δ_1 , Δ_l , ϕ_1 , y ϕ_l son cantidades a determinar, y $Q \simeq 2K_F$. Sustituyendo estas expresiones en (70) llegamos a

$$\begin{aligned} H_{MF} = & UN\bar{n}^2 - \frac{1}{2}U\Delta_1\Delta_l \cos(\phi_1 - \phi_l) + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \\ & + U\Delta_1 \sum_l \cos(Ql + \phi_1) \eta_{li} + U\Delta_l \sum_l \cos(Ql + \phi_l) \eta_{li}. \end{aligned} \quad (73)$$

Es conveniente pasar a la representación de momento, que se obtiene sustituyendo en el término $\eta_{l\sigma} = c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma}$ la expansión (51), de donde

$$\begin{aligned} H_{MF} = & UN\bar{n}^2 - \frac{1}{2}U\Delta_1\Delta_l \cos(\phi_1 - \phi_l) + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \\ & + \frac{1}{2}U\Delta_l e^{i\phi_l} \sum_k c_{k+Q_1}^\dagger c_{k1} + \frac{1}{2}U\Delta_l e^{-i\phi_l} \sum_k c_{k1}^\dagger c_{k+Q_1} \\ & + \frac{1}{2}U\Delta_l e^{i\phi_l} \sum_k c_{k+Q_1}^\dagger c_{k1} + \frac{1}{2}U\Delta_l e^{-i\phi_l} \sum_k c_{k1}^\dagger c_{k+Q_1}. \end{aligned} \quad (74)$$

El Hamiltoniano se separa de manera natural en dos partes, y el problema se reduce a diagonalizar, para cada espín, un Hamiltoniano de la forma

$$h = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \gamma e^{i\phi} \sum_k c_{k+Q}^\dagger c_k + \gamma e^{-i\phi} \sum_k c_k^\dagger c_{k+Q}. \quad (75)$$

Si U es muy pequeña o estamos suficientemente cerca de la temperatura de transición ($\Delta_\sigma \ll 1$), podemos tratar los dos últimos términos de (75) perturbativamente. De teoría

de perturbaciones sabemos que, para un potencial de tipo sinusoidal con amplitud γ y vector de onda Q , sólo estados alrededor de $\pm \frac{1}{2}Q$ se ven significativamente afectados a primer orden en γ . Con $Q \simeq 2K_F$, tenemos que los estados con $k \simeq \pm K_F$ juegan un papel preponderante en la formación de la densidad de espín debajo de la temperatura crítica. Recordando que son precisamente transiciones entre dichos estados los que hacen la fase paramagnética inestable, podemos tener un idea cualitativa del mecanismo implícito en la formación de la ODE: Debajo de la temperatura crítica se abre un brecha ('gap') en el nivel de Fermi que "empuja" hacia abajo la energía de los estados ocupados, a la vez que elimina la singularidad a $k = 2K_F$.

Con lo anterior en mente, hacemos la siguiente aproximación de "dos bandas". En el hamiltoniano (75) ignoramos el acoplamiento entre estados con $|k| > |Q|$, de forma que sólo retenemos términos $c_k^\dagger c_{k+Q}, c_{k+Q}^\dagger c_k$ con $k, k+Q$ en $(-Q, Q)$. En dicha aproximación, hacemos la descomposición $h = h_{red} + h^{(0)}$, con

$$h_{red} = \sum_{k=-Q}^0 [\epsilon_k c_k^\dagger c_k + \epsilon_{k+Q} c_{k+Q}^\dagger c_{k+Q} + \gamma e^{i\phi} c_{k+Q}^\dagger c_k + \gamma e^{-i\phi} c_k^\dagger c_{k+Q}] \quad (76)$$

y procedemos a diagonalizar h_{red} , ignorando $h^{(0)}$. Para ello, utilizamos una transformación del tipo de Bogoliubov [48], introduciendo nuevos operadores de Fermi α_k, β_k tales que, con $-Q \leq k \leq 0$,

$$\begin{aligned} c_k &= u_k \alpha_k + v_k \beta_k \\ c_{k+Q} &= w_k \beta_k + z_k \alpha_k. \end{aligned} \quad (77)$$

Se puede mostrar que los nuevos operadores cumplen las condiciones de anti-conmutación apropiadas para fermiones si imponemos las constricciones

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = |w_k|^2 + |z_k|^2 = 1$$

$$u_k z_k^* + w_k^* v_k = 0, \quad (78)$$

que se satisfacen si escogemos dichas constantes de la forma general

$$u_k = e^{-i\delta} \cos \Phi_k \quad (79)$$

$$v_k = \sin \Phi_k$$

$$w_k = e^{i\delta} \cos \Phi_k \quad (80)$$

$$z_k = -\sin \Phi_k. \quad (81)$$

La idea es determinar Φ y δ que diagonalicen h_{red} . El procedimiento es algo largo pero directo. Se escribe el Hamiltoniano (76) en término de los nuevos operadores de acuerdo a su definición (77), y se igualan a cero los coeficientes de términos cruzados como $\alpha_k \beta_k^\dagger$, $\alpha_k^\dagger \beta_k$, etc. Se encuentra que con Φ_k tal que

$$\sin 2\Phi_k = \frac{2\gamma}{\sqrt{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)^2 + 4\gamma^2}} \quad (82)$$

$$\cos 2\Phi_k = \frac{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)}{\sqrt{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)^2 + 4\gamma^2}}, \quad (83)$$

se puede describir el hamiltoniano (76) de la forma

$$h_{red} = \sum_{k=-Q}^0 \epsilon_k(\alpha) \alpha_k^\dagger \alpha_k + \epsilon_k(\beta) \beta_k^\dagger \beta_k \quad (84)$$

con

$$\epsilon_k(\alpha) = \frac{1}{2}(\epsilon_{k+Q} + \epsilon_k) - \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)^2 + 4|\gamma|^2} \quad (85)$$

$$\epsilon_k(\beta) = \frac{1}{2}(\epsilon_{k+Q} + \epsilon_k) + \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)^2 + 4|\gamma|^2}. \quad (86)$$

Las energías $\epsilon_k(\alpha)$ y $\epsilon_k(\beta)$ definen dos bandas de energías en el intervalo $(-Q, 0)$, con estados que mezclan ondas planas en $(-Q, Q)$. En el siguiente orden de aproximación se

obtienen correcciones a estas energías (y las del último término en (84)), con términos de la forma $|\gamma|^2/(\epsilon_k - \epsilon_{k\pm Q})$, con $|\gamma| \ll |\epsilon_k - \epsilon_{k\pm Q}|$.

Volvemos al hamiltoniano original (74), que ahora podemos escribir como

$$\begin{aligned} H_{MF} &= \sum_{k=-Q}^0 \epsilon_{k1}(\alpha) \alpha_{k1}^\dagger \alpha_{k1} + \epsilon_{k1}(\beta) \beta_{k1}^\dagger \beta_{k1} \\ &+ \sum_{k=-Q}^0 \epsilon_{k1}(\alpha) \alpha_{k1}^\dagger \alpha_{k1} + \epsilon_{k1}(\beta) \beta_{k1}^\dagger \beta_{k1} \\ &- \frac{1}{2} U \Delta_1 \Delta_1 \cos(\phi_1 - \phi_1) \end{aligned} \quad (87)$$

con

$$\epsilon_{k1,1}(\alpha) = \frac{1}{2}(\epsilon_{k+Q} + \epsilon_k) - \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)^2 + U^2 \Delta_{1,1}^2} \quad (88)$$

$$\epsilon_{k1,1}(\beta) = \frac{1}{2}(\epsilon_{k+Q} + \epsilon_k) + \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)^2 + U^2 \Delta_{1,1}^2}. \quad (89)$$

Ahora bien, en la aproximación de campo medio, la energía libre del sistema esta dada por

$$F = \langle H_{MF} - \mu N_o \rangle - TS, \quad (90)$$

donde $\langle \rangle$ denota ahora promedio de ensamble, μ el potencial químico, N_o el número total de partículas, y S la entropía del sistema. Como N_o es constante, podemos sin pérdida de generalidad medir todas las energías respecto al potencial químico μ , de forma que el término μN_o queda implícito en H_{MF} . Definiendo $f_{k\sigma}(\alpha) = \langle \alpha_{k\sigma}^\dagger \alpha_{k\sigma} \rangle$ y $f_{k\sigma}(\beta) = \langle \beta_{k\sigma}^\dagger \beta_{k\sigma} \rangle$, tenemos

$$\begin{aligned} F &= \sum_{k=-Q}^0 \epsilon_{k1}(\alpha) f_{k1}(\alpha) + \epsilon_{k1}(\beta) f_{k1}(\beta) + \epsilon_{k1}(\alpha) f_{k1}(\alpha) + \epsilon_{k1}(\beta) f_{k1}(\beta) \\ &+ k_B T \sum_{k,\sigma} f_{k\sigma}(\alpha) \log[f_{k\sigma}(\alpha)] + (1 - f_{k\sigma}(\alpha)) \log[1 - f_{k\sigma}(\alpha)] \\ &+ k_B T \sum_{k,\sigma} f_{k\sigma}(\beta) \log[f_{k\sigma}(\beta)] + (1 - f_{k\sigma}(\beta)) \log[1 - f_{k\sigma}(\beta)] \end{aligned}$$

$$- \frac{1}{2} U \Delta_1 \Delta_1 \cos(\phi_1 - \phi_1). \quad (91)$$

Si tomamos las funciones $f_{k\sigma}(\alpha)$, $f_{k\sigma}(\beta)$ como parámetros variacionales y hacemos $\frac{\partial F}{\partial f_{k\sigma}(\alpha)}$, $\frac{\partial F}{\partial f_{k\sigma}(\beta)} = 0$, obtenemos

$$f_{k\sigma}(\alpha) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\epsilon_{k\sigma}(\alpha)}{k_B T}\right] + 1}; \quad f_{k\sigma}(\beta) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\epsilon_{k\sigma}(\beta)}{k_B T}\right] + 1}, \quad (92)$$

como es de esperarse.

Con las funciones de distribución fijas, tomamos ahora Δ_1 como parámetro variacional.

Haciendo $\frac{\partial F}{\partial \Delta_1} = 0$, obtenemos

$$\sum_k \frac{\partial \epsilon_{k1}(\alpha)}{\partial \Delta_1} f_{k1}(\alpha) + \frac{\partial \epsilon_{k1}(\beta)}{\partial \Delta_1} f_{k1}(\beta) = \frac{1}{2} U N \Delta_1 \cos(\phi_1 - \phi_1), \quad (93)$$

de donde, usando las expresiones (88), obtenemos la siguiente expresión

$$\frac{1}{N} \sum_{k < 0} \frac{f_{k1}(\alpha) - f_{k1}(\beta)}{\sqrt{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)^2 + U^2 \Delta_1^2}} = - \frac{\Delta_1}{U \Delta_1} \cos(\phi_1 - \phi_1). \quad (94)$$

El lado izquierdo de esta ecuación es positivo definido, pues para toda k , $f_{k1}(\alpha) > f_{k1}(\beta)$.

Tenemos además una ecuación idéntica pero con los spines intercambiados. Con $U > 0$, se puede mostrar que la opción óptima es $\Delta_1 = \Delta_1 = \Delta$ y $(\phi_1 - \phi_1) = \pi$. Con dichos valores, la ocupación de los estados alrededor del nivel de Fermi es tal que las amplitudes de probabilidad electrones con espín \uparrow es máxima en los nodos de las funciones de onda de los electrones con espín \downarrow , lo que resulta en una ganancia neta en energía de intercambio.

La ecuación que determina el parámetro Δ es

$$\frac{1}{N} \sum_{k < 0} \frac{f_{k1}(\alpha) - f_{k1}(\beta)}{\sqrt{(\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k)^2 + U^2 \Delta^2}} = \frac{1}{U}. \quad (95)$$

Esta última ecuación se puede derivar de otra manera que aclara su significado. Uno puede pasar al esquema de Schrödinger y encontrar expresiones explícitas para las funciones de onda correspondientes a las energías $\epsilon_{k1}(\alpha), \epsilon_{k1}(\beta), \dots$, etc. Por ejemplo,

$$\psi_{k1}^{\alpha}(l) = \frac{\frac{1}{2}U\Delta_1 e^{-i\phi_1} e^{ikl} + (\epsilon_{k1}(\alpha) - \epsilon_k) e^{i(k+Q)l}}{\sqrt{(\epsilon_{k1}(\alpha) - \epsilon_k)^2 + \frac{1}{4}U^2\Delta_1^2}}, \quad (96)$$

es tal que $|\psi_{k1}^{\alpha}(l)|^2$ da la probabilidad de que un electrón en el estado (α, k, \uparrow) se encuentre en el sitio l ésimo. La densidad total para los electrones con espín \uparrow está entonces dada por

$$\langle \eta_{\uparrow} \rangle = \sum_k |\psi_{k1}^{\alpha}(l)|^2 f_{k1}(\alpha) + |\psi_{k1}^{\beta}(l)|^2 f_{k1}(\beta), \quad (97)$$

de modo que la condición de autoconsistencia es

$$\sum_k |\psi_{k1}^{\alpha}(l)|^2 f_{k1}(\alpha) + |\psi_{k1}^{\beta}(l)|^2 f_{k1}(\beta) = \bar{n} + \Delta_1 \cos(Ql + \phi_1). \quad (98)$$

Escribiendo el lado izquierdo de esta ecuación en términos de las funciones de onda del tipo (96) se obtiene de nuevo la condición (95).

Ahora bien, a la temperatura crítica, $\Delta \rightarrow 0$. Al tomar este límite, recuperamos el caso en que las funciones de onda son simples ondas planas, y la estructura electrónica es idéntica para las dos direcciones de espín. De (95) obtenemos

$$\frac{1}{N} \sum_{k=-Q}^Q \left(\frac{f_{k+Q} - f_k}{\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}} \right) = \frac{1}{U}, \quad (99)$$

que difiere de (67) en los límites de la suma sobre k . Dicha discrepancia proviene de la aproximación hecha al "truncar" el hamiltoniano original. Si queremos recuperar dicha expresión, hay que hacer el tratamiento perturbativo completo a segundo orden. Sin embargo, las correcciones son pequeñas comparadas con los términos para los cuales $\epsilon_k \simeq \epsilon_{k+Q}$.

En el caso general en que la amplitud de la ODE no es pequeña, el problema no admite un tratamiento sencillo, excepto en el caso especial de llenado medio, en el cual la aproximación de dos bandas es válida a todo orden de aproximación ($2K_F = \pi$). Cabe mencionar que se ha mostrado que el Hamiltoniano (50) tiene solución exacta [52]. Sin embargo, la solución se da implícitamente en un el sistema de ecuaciones integrales que sólo se puede resolver para llenado medio, en cuyo caso se muestra que para toda U finita, el estado base del sistema corresponde al de un aislante. Para 2 y 3 dimensiones el hamiltoniano de Hubbard sólo es tratable analíticamente en los límites $U/\tau \ll 1$ y $U/\tau \gg 1$.

IX Superred Modelo.

En esta sección presentamos y discutimos el modelo cuyo estudio constituye el objetivo principal de este trabajo. Nuestro hamiltoniano básico es

$$H^{(0)} = \sum_{l,\sigma} [\epsilon_l c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma} - \tau_{l,l-1} c_{l-1\sigma}^\dagger c_{l\sigma} - \tau_{l,l+1} c_{l+1\sigma}^\dagger c_{l\sigma}] + \sum_l U_l \eta_{l\uparrow} \eta_{l\downarrow}, \quad (100)$$

donde $c_{l\sigma}$ ($c_{l\sigma}^\dagger$) aniquila (crea) un electrón de espín σ en el sitio l 'ésimo, y $\eta_{l\sigma} = c_{l\sigma} c_{l\sigma}^\dagger$. $\tau_{l,l'}$ representa la amplitud de probabilidad de salto entre los sitios l y l' ; ϵ_l es la energía del estado localizado en el átomo l 'ésimo, y U_l es la repulsión coulombiana que dos electrones de espín opuesto sienten al coincidir en dicho átomo.

Asumimos que existe una celda unitaria que se repite periódicamente, cada una con n_c átomos. Luego, las diferentes cantidades que entran en (100) cumplen con

$$\tau_{l-1,l} = \tau_{l-1+n_c,l+n_c} \quad (101)$$

$$\epsilon_l = \epsilon_{l+n_c} \quad (102)$$

$$U_l = U_{l+n_c}. \quad (103)$$

Procedemos ahora a hacer la aproximación de campo medio, en la que reemplazamos en el término de interacción coulombiana $\eta_{l\sigma}$ con $\langle \eta_{l\sigma} \rangle + \delta\eta_{l\sigma}$, donde $\delta\eta_{l\sigma} = (\eta_{l\sigma} - \langle \eta_{l\sigma} \rangle)$ se trata como una pequeña fluctuación en el número de ocupación electrónica. Reteniendo sólo términos lineales en $\delta\eta_{l\sigma}$ en el hamiltoniano, obtenemos

$$H_{ef}^{(0)} = \sum_{l,\sigma} [\epsilon_{l\sigma} c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma} - \tau_{l,l-1} c_{l-1\sigma}^\dagger c_{l\sigma} - \tau_{l,l+1} c_{l+1\sigma}^\dagger c_{l\sigma}] - \sum_l U_l \langle \eta_{l\uparrow} \rangle \langle \eta_{l\downarrow} \rangle, \quad (104)$$

donde definimos $\epsilon_{l\sigma} = \epsilon_l + U_l \langle \eta_{l\bar{\sigma}} \rangle$. El primer término de la ec. (104) define el problema de un electrón moviéndose en un potencial efectivo que incluye la densidad promedio de los electrones de espín opuesto.

a Ecuaciones Autoconsistentes.

Si el sistema es periódico con periodo de n_c átomos, entonces los estados propios de los electrones se pueden representar por medio de funciones de Bloch, diferentes para las dos posibles direcciones de espín si estamos por debajo de la temperatura crítica. Como vamos a mostrar más adelante, a cada función de Bloch se le puede asociar un vector de onda $k \subset (-\frac{\pi}{n_c}, \frac{\pi}{n_c})$ en la "mini-zona" de Brillouin de la superred, así como un índice de banda $n = 1, \dots, n_c$. Denotamos entonces las funciones de Bloch como $\psi_{nk\sigma}(l)$, y el conjunto $\{\psi_{nk\sigma}(l)\}$ es un conjunto completo en el espacio de posibles funciones de onda de un electrón. Luego, del formalismo de segunda cuantización sigue que los operadores de aniquilación y creación $c_{l\sigma}, c_{l\sigma}^\dagger$ que aparecen en (100) se pueden expresar como

$$\begin{aligned}c_{l\sigma} &= \sum_{n,k} \psi_{nk\sigma}(l) c_{nk\sigma} \\c_{l\sigma}^\dagger &= \sum_{n,k} \psi_{nk\sigma}^*(l) c_{nk\sigma}^\dagger,\end{aligned}\tag{105}$$

donde $c_{nk\sigma}^\dagger$ ($c_{nk\sigma}$) aniquila (crea) un electrón en el estado de Bloch (n, k, σ) .

Pasamos ahora a derivar el problema de valores propios que determina el conjunto $\{\psi_{nk\sigma}(l)\}$. Aunque esto se puede hacer usando directamente el hamiltoniano de campo medio $H_{ef}^{(0)}$, resulta instructivo volver al hamiltoniano original (100) y hacer la aproximación de campo medio en las ecuaciones de movimiento. Primero, escribimos la ecuación de movimiento para los operadores de campo en el esquema de Heisenberg

$$[H^{(0)}, c_{l\sigma}] = -i\hbar \dot{c}_{l\sigma}.\tag{106}$$

Para evaluar el conmutador en el lado izquierdo de esta ecuación, usamos las propiedades

de anticonmutación (52), de donde obtenemos

$$\begin{aligned} [H^{(0)}, c_{l1}] &= \tau_{l-1} c_{l-1} - \varepsilon_l c_{l1} + \tau_{l,l+1} c_{l+1} - U_l c_{l1}^\dagger c_{l1} c_{l1} \\ [H^{(0)}, c_{l1}] &= \tau_{l-1} c_{l-1} - \varepsilon_l c_{l1} + \tau_{l,l+1} c_{l+1} - U_l c_{l1}^\dagger c_{l1} c_{l1}. \end{aligned} \quad (107)$$

Usando la expansión (106), podemos escribir estas ecuaciones en términos de las funciones de onda de Bloch:

$$\begin{aligned} [H^{(0)}, c_{l1}] &= \sum_{nk} \{ \tau_{l-1} \psi_{nk1}(l-1) - \varepsilon_l \psi_{nk1}(l) + \tau_{l,l+1} \psi_{nk1}(l+1) \} c_{nk1} \\ &\quad - U_l \sum_{nk} \sum_{n'k'} \sum_{n''k''} \psi_{n'k'1}^*(l) \psi_{n''k''1}(l) \psi_{nk1}(l) c_{n'k'1}^\dagger c_{n''k''1} c_{nk1} \\ [H^{(0)}, c_{l1}] &= \sum_{nk} \{ \tau_{l-1} \psi_{nk1}(l-1) - \varepsilon_l \psi_{nk1}(l) + \tau_{l,l+1} \psi_{nk1}(l+1) \} c_{nk1} \\ &\quad - U_l \sum_{nk} \sum_{n'k'} \sum_{n''k''} \psi_{n'k'1}^*(l) \psi_{n''k''1}(l) \psi_{nk1}(l) c_{n'k'1}^\dagger c_{n''k''1} c_{nk1} \end{aligned} \quad (108)$$

La aproximación de campo medio equivale a hacer la identificación

$$\sum_{n'k'} \sum_{n''k''} \psi_{n'k'\sigma}^*(l) \psi_{n''k''\sigma}(l) c_{n'k'\sigma}^\dagger c_{n''k''\sigma} = \sum_{n'k'} \psi_{n'k'\sigma}^*(l) \psi_{n'k'\sigma}(l) \langle c_{n'k'\sigma}^\dagger c_{n'k'\sigma} \rangle, \quad (109)$$

con

$$\langle c_{nk\sigma}^\dagger c_{nk\sigma} \rangle = f_{nk\sigma} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{nk\sigma} - \mu)} + 1} \quad (110)$$

la función de distribución de Fermi, μ el potencial químico y $\beta = (k_B T)^{-1}$.

Por otro lado, si denotamos como $\epsilon_{nk\sigma}$ la energía correspondiente a la función de onda $\psi_{nk\sigma}$ en el esquema de Schroedinger, entonces

$$-i\hbar \dot{\psi}_{l\sigma} = \sum_{nk\sigma} -i\hbar \dot{\psi}_{nk\sigma}(l) c_{nk\sigma} = - \sum_{nk\sigma} \epsilon_{nk\sigma} \psi_{nk\sigma}(l) c_{nk\sigma}. \quad (111)$$

Finalmente, combinando (106), (108), (109), y (111) obtenemos las ecuaciones autoconsistentes a resolver:

$$\begin{aligned} \epsilon_{nk1} \psi_{nk1}(l) &= [\epsilon_l + U_l < \eta_{l1} >] \psi_{nk1}(l) - \tau_{l,l-1} \psi_{nk1}(l-1) - \tau_{l,l+1} \psi_{nk1}(l+1) \\ \epsilon_{nk1} \psi_{nk1}(l) &= [\epsilon_l + U_l < \eta_{l1} >] \psi_{nk1}(l) - \tau'_{l,l-1} \psi_{nk1}(l-1) - \tau'_{l,l+1} \psi_{nk1}(l+1) \end{aligned} \quad (112)$$

con la condición de autoconsistencia

$$\begin{aligned} < \eta_{l1} > &= \sum_{n,k} f_{nk1} \psi_{nk1}^*(l) \psi_{nk1}(l) \\ < \eta_{l1} > &= \sum_{n,k} f_{nk1} \psi_{nk1}^*(l) \psi_{nk1}(l). \end{aligned} \quad (113)$$

En la deducción anterior no hemos hecho uso de la periodicidad de la superred, aunque dicha simetría esta implícita en la forma en que hemos etiquetado los estados. Sea N el número de celdas unitarias de la superred, de modo que $M = n_c \times N$ es el número total de sitios. Tal como estan escritas, las ecuaciones (112) definen un problema de valores propios que implica invertir una matriz $M \times M$ para cada dirección de espín. El siguiente paso consiste en usar la simetría de la superred (103) de forma de reducir el problema a invertir, para cada espín, N veces una matrix de $n_c \times n_c$.

Primero, escribimos las funciones de onda de Bloch como

$$\psi_{nk\sigma}(l) = e^{ikl} \phi_{nk\sigma}(l), \quad (114)$$

con

$$\phi_{nk\sigma}(l) = \phi_{nk\sigma}(l + n_c). \quad (115)$$

la parte periódica de la función de Bloch, o función de Wannier. Sustituyendo (115) en (112) lleva al siguiente sistema de n_c ecuaciones homogéneas en las funciones de Wannier:

$$[\epsilon_{l\sigma} - \epsilon_{nk\sigma}] \phi_{nk\sigma}(l) - \tau_{l-1,l} e^{-ik} \phi_{nk\sigma}(l-1) - \tau_{l,l+1} e^{ik} \phi_{nk\sigma}(l+1) = 0, \quad (116)$$

con $l = 1 \dots n_c$. Para cada k obtenemos n_c soluciones con sus correspondientes energías $\epsilon_{nk\sigma}$, que etiquetamos con número de banda $n = 1, \dots, n_c$. Si el sistema consiste de N celdas unitarias, e imponemos condiciones de contorno periódicas, obtenemos N valores permitidos de k en $(-\pi/n_c, \pi/n_c)$, la primera "mini-zona" de Brillouin de la superred. Podemos entonces contruir un esquema reducido de "mini-bandas" asignando las n_c diferentes energías a cada k , o podemos extender la estructura de forma que la primera mini-banda se grafica en el intervalo $(-\pi/n_c, \pi/n_c)$, la segunda mini-banda en $(-2\pi/n_c, -\pi/n_c)$ y $(\pi/n_c, 2\pi/n_c)$, y así sucesivamente. Cada función de Bloch $\psi_{nk\sigma}$ esta normalizada como

$$\sum_{\text{toda } l} \psi_{nk\sigma}^*(l) \psi_{nk\sigma}(l) = 1,$$

o equivalentemente para las $\phi_{nk\sigma}$'s

$$\sum_{l=1}^{n_c} \phi_{nk\sigma}^*(l) \phi_{nk\sigma}(l) = 1/N.$$

Ahora bien, cualquier función discreta periódica con periodo n_c se puede expandir en términos de n_c vectores recíprocos también discretos. Denotamos estos últimos como g , de manera que

$$g = \begin{cases} 0, \pm \frac{2\pi}{n_c}, \dots, \pm 2\pi \frac{n_c - 2m}{n_c}, \dots, \pi & \text{si } n_c \text{ par } (m = n_c/2, \dots, 0) \\ 0, \pm \frac{2\pi}{n_c}, \dots, \pm \frac{(n_c - 1)\pi}{n_c} & \text{si } n_c \text{ impar.} \end{cases} \quad (117)$$

Luego, podemos hacer la siguiente expansión

$$\phi_{nk}(l) = \sum_g \xi_{nk}(g) e^{igl}, \quad (118)$$

donde los coeficientes de la expansión estan dados por

$$\xi_{nk}(g) = \frac{1}{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} \phi_{nk}(l) e^{-igl}. \quad (119)$$

Aplicando estas transformaciones a las ecuaciones (116) obtenemos el sistema de ecuaciones

$$\sum_{g'} \{ \epsilon_{\sigma}(g-g') - 2\tau(g-g') \cos(k+g) \} \xi_{nko}(g') = \epsilon_{nko} \xi_{nk}(g), \quad (120)$$

con

$$\tau(g) = \frac{1}{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} \tau_{l-1,l} e^{-ig^l} \quad (121)$$

$$\epsilon_{\sigma}(g) = \frac{1}{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} \epsilon_{l\sigma} e^{-ig^l}. \quad (122)$$

En el límite homogéneo, $\epsilon_{g-g} = \epsilon \delta_{g,g'}$ y $\tau_{g-g} = \tau \delta_{g,g'}$, de modo que recuperamos la relación de dispersión:

$$\epsilon(g+k) = \epsilon - 2\tau \cos(g+k), \quad (123)$$

siendo las funciones de Bloch simples ondas planas. Naturalmente, en este caso la separación de los vectores de onda en vectores de la red recíproca de la superred y vectores en la primera "mini-zona" de Brillouin es artificial.

Para hacer la deducción anterior, supusimos que las densidades autoconsistentes $\langle \eta_{II} \rangle$ y $\langle \eta_{II} \rangle$ tienen también la periodicidad de la superred. Dicha suposición es menos obvia de lo que pudiera parecer en un principio, pues uno puede imaginar ordenamientos magnéticos con periodos inconmesurables con el periodo de la superred. Para aclarar este punto, considérese el caso del sistema uniforme, discutido en la sección anterior. Debajo de la temperatura crítica, la simetría ante traslaciones se rompe. Si la amplitud de la densidad de espín es grande, el tratamiento perturbativo falla, y en general hay que encontrar numéricamente la densidad de espín resolviendo iterativamente un sistema de ecuaciones autoconsistente tal como el descrito para la superred, escogiendo como celda unitaria el periodo que uno espera para la densidad de espín, i.e. $2K_F$. Si $2K_F = 2p\pi/q$, con $p \leq q$

enteros, entonces en principio habría que tomar $n_c = p \times q$. En la práctica uno puede obtener una idea de que tan grave es la aproximación repitiendo el cálculo doblando o triplicando la celda unitaria, manteniendo todos los demás parámetros fijos. En los ejemplos considerados en el presente trabajo se investigó el efecto de doblar la celda unitaria, encontrándose pocos cambios.

b Susceptibilidad Magnética.

Una vez calculada la estructura electrónica del modelo, podemos proceder a estudiar la susceptibilidad lineal de espín del mismo. En la red unidimensional uniforme, dicha susceptibilidad presenta una singularidad logarítmica conforme la temperatura tiende a la temperatura crítica a la que la ODE se forma. Arriba de la temperatura crítica, la simetría ante traslaciones del sistema uniforme implica que la susceptibilidad depende sólo del vector de onda del campo externo, y el vector de onda al que se da la singularidad determina la variación espacial de la densidad de espín. Nuestro interés principal reside en estudiar el comportamiento de la susceptibilidad de espín para el caso de una superred. Considérese el sistema descrito por el hamiltoniano original Ec.(100), pero en presencia de un campo magnético externo. En unidades apropiadas, tenemos ahora

$$H = H^{(0)} - \sum_l h_l (\eta_{l1} - \eta_{l2}). \quad (124)$$

Aquí, h_l es el campo magnético externo, que en general varía de sitio a sitio.

Podemos generar un descripción tipo RPA de la respuesta del sistema, generalizando la teoría de campo medio descrita anteriormente al obtener las ecuaciones autoconsistentes. En presencia de un campo externo débil, los valores de expectación de las densidades electrónicas $\langle \eta_{l\sigma} \rangle$ cambian linealmente con el campo. Definimos las densidades inducidas

$\Delta_{l\sigma}$ como

$$\langle \eta_{l\sigma} \rangle = \langle \eta_{l\sigma}^0 \rangle + \sigma \Delta_{l\sigma}, \quad (125)$$

donde $\sigma = +1$ para los espines \uparrow , y $\sigma = -1$ para los espines \downarrow . Las $\Delta_{l\sigma}$ se toman a primer orden en el campo, y $\langle \eta_{l\sigma}^0 \rangle = \lim_{h \rightarrow 0} \langle \eta_{l\sigma} \rangle$. Si el sistema se encuentra en su fase paramagnética $\Delta_{l\uparrow} = \Delta_{l\downarrow}$, pero si existe algún tipo de magnetización espontánea pueden ser diferentes [59].

Procedemos tal como en la sección anterior, reescribiendo los operadores de densidad como la suma de su valor medio más fluctuaciones, e ignorando términos cuadráticos en la fluctuaciones. Así mismo ignoramos términos cuadráticos en el campo externo. Haciendo esto, obtenemos el hamiltoniano efectivo en presencia del campo

$$H = H_{eJ}^{(0)} - \sum_l (h_l + U_l \Delta_{l\downarrow}) \eta_{l\downarrow} + \sum_l (h_l + U_l \Delta_{l\uparrow}) \eta_{l\uparrow} - \sum_l U_l [\langle \eta_{l\downarrow} \rangle \langle \eta_{l\uparrow} \rangle - \langle \eta_{l\downarrow}^0 \rangle \langle \eta_{l\uparrow}^0 \rangle]. \quad (126)$$

$H_{eJ}^{(0)}$ está dado por la ec. (104) y describe electrones independientes con espín \uparrow (\downarrow) moviéndose en el potencial autoconsistente $\varepsilon_l + U_l \langle \eta_{l\downarrow}^0 \rangle$ ($\varepsilon_l + U_l \langle \eta_{l\uparrow}^0 \rangle$). En el segundo término, los electrones con espín \uparrow en el sitio l mismo sienten un campo efectivo $-(h_l + U_l \Delta_{l\downarrow})$, mientras que los electrones con espín \downarrow sienten $(h_l + U_l \Delta_{l\uparrow})$.

Definimos las susceptibilidades $\chi_\sigma^{(o)}(l, l')$ como sigue. Supóngase que los electrones de espín σ sienten un campo efectivo $\delta_{l'\sigma}$ aplicado al sitio l' ; entonces, la densidad inducida de electrones σ en el sitio l está dada por $\Delta_{l\sigma} = \chi_\sigma^{(o)}(l, l')$. Con esta definición, las ecuaciones autoconsistentes para $\Delta_{l\uparrow}$ y $\Delta_{l\downarrow}$ son:

$$\Delta_{l\uparrow} = \sum_{l'} \chi_\uparrow^{(o)}(l, l') [h_{l'} + U_{l'} \Delta_{l'\uparrow}] \quad (127)$$

$$\Delta_{l1} = \sum_{l'} \chi_1^{(0)}(l, l') [h_{l'} + U_{l'} \Delta_{l'1}] \quad (128)$$

Estas ecuaciones a su vez se pueden invertir en principio y obtener

$$\Delta_{l1} = \sum_{l'} \chi_{l1}(l, l') h_{l'} \quad (129)$$

$$\Delta_{l1} = \sum_{l'} \chi_{l1}(l, l') h_{l'}, \quad (130)$$

que definen las susceptibilidades para cada una de las poblaciones de spin. Combinando las ecuaciones (128) y (130) obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones acopladas a resolver

$$\begin{aligned} \sum_m \sum_n [\delta_{l,m} \delta_{m,n} - \chi_1^{(0)}(l, m) U_m \chi_1^{(0)}(m, n) U_n] \chi_1(n, l') = \\ \chi_1^{(0)}(l, l') + \sum_m \chi_1^{(0)}(l, m) U_m \chi_1^{(0)}(m, l'), \\ \sum_m \sum_n [\delta_{l,m} \delta_{m,n} - \chi_1^{(0)}(l, m) U_m \chi_1^{(0)}(m, n) U_n] \chi_1(n, l') = \\ \chi_1^{(0)}(l, l') + \sum_m \chi_1^{(0)}(l, m) U_m \chi_1^{(0)}(m, l'), \end{aligned} \quad (131)$$

con $l, l', m, n = 1, \dots, Nn_c$.

Con la convención de signo usada en (125) al definir Δ_{l1} y Δ_{l1} , la densidad de espín inducida esta dada por $s_l = \frac{1}{2}(\Delta_{l1} + \Delta_{l1})$. Si definimos la susceptibilidad de espín como $\chi(l, l')$, tal que

$$s_l = \sum_{l'} \chi(l, l') h_{l'}, \quad (132)$$

entonces

$$\chi(l, l') = \frac{1}{2}(\chi_{l1}(l, l') + \chi_{l1}(l, l')). \quad (133)$$

El siguiente paso consiste en obtener $\chi_\sigma^{(0)}(l, l')$. Para ello, notamos que los campos efectivos que entran en (126) se pueden tomar como una perturbación al hamiltoniano $H_{\sigma f}^{(0)}$, de modo que podemos aplicar teoría de perturbaciones a primer orden usando la

estructura electrónica obtenida al diagonalizar autoconsistentemente dicho hamiltoniano.

El procedimiento es directo y lleva a la siguiente expresión:

$$\chi_{\sigma}^{(0)}(l, l') = \sum_{n, k} \sum_{n', k'} \left(\frac{f_{n'k'\sigma} - f_{nk\sigma}}{\varepsilon_{nk\sigma} - \varepsilon_{n'k'\sigma}} \right) \psi_{nk\sigma}^*(l) \psi_{n'k'\sigma}^*(l') \psi_{nk\sigma}(l') \psi_{n'k'\sigma}(l). \quad (134)$$

donde las funciones de Bloch $\psi_{nk\sigma}(l)$ y sus correspondientes energías $\varepsilon_{nk\sigma}$ se obtienen resolviendo el sistema de ecuaciones (112), con $f_{nk\sigma}$ la función de distribución de Fermi.

Notamos que

$$\chi_{\sigma}^{(0)}(l, l') = \chi_{\sigma}^{(0)}(l + n_c, l' + n_c), \quad (135)$$

como debe de ser, dada la simetría del problema.

c Representaciones de la Susceptibilidad.

Pasamos ahora a considerar diferentes representaciones de $\chi_{\sigma}^{(0)}(l, l')$ y $\chi_{\sigma}(l, l')$. La representación en espacio real no es la mejor opción para nuestros propósitos. Las transformaciones dadas abajo resultan útiles tanto desde el punto de vista de la interpretación física de los resultados, como del cálculo numérico involucrado.

Considérese una función $F(l)$ definida para todos los sitios de nuestro sistema. Tenemos condiciones de contorno periódicas, de modo que si la red consta de N celdas unitarias con n_c sitios cada una, entonces $F(l) = F(l + Nn_c)$. Definimos la transformada [17]

$$F(Q; l) = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} F(l + mn_c) e^{-iQ(l+mn_c)} \quad (136)$$

donde $-\pi/n_c \leq Q \leq \pi/n_c$, i.e. Q es un vector en la "mini-zona" de la superred. De la definición es claro que $F(Q; l) = F(Q; l + n_c)$. La transformación inversa esta dada por

$$F(l) = \sum_Q F(Q; l) e^{iQl}. \quad (137)$$

Si aplicamos esta transformación en ambos lados de las Eqs. (130) obtenemos

$$\Delta_{Q;l\sigma} = \sum_{l'=1}^{n_c} \chi_{\sigma}(Q; l, l') h_{Q;l'l'}, \quad (138)$$

donde

$$\chi_{\sigma}(Q; l, l') = \sum_{m=0}^{N-1} \chi_{\sigma}(l, l') e^{-iQ(l-l'+mn_c)}, \quad (139)$$

con la transformada inversa dada por

$$\chi_{\sigma}(l + mn_c, l' + m'n_c) = \frac{1}{N} \sum_Q \chi_{\sigma}(Q; l, l') e^{iQ(l-l'+(m-m')n_c)}. \quad (140)$$

Nótese que

$$\chi_{\sigma}(Q; l, l') = \chi_{\sigma}(Q; l + n_c, l') = \chi_{\sigma}(Q; l, l' + n_c). \quad (141)$$

En esta representación, la susceptibilidad de electrón independiente (134) toma la forma

$$\chi_{\sigma}^{(0)}(Q; l, l') = N \sum_{n,n'} \sum_k \left(\frac{f_{n'k+Q\sigma} - f_{nk\sigma}}{\epsilon_{nk\sigma} - \epsilon_{n'k+Q\sigma}} \right) \phi_{nk\sigma}^*(l) \phi_{n'k+Q\sigma}^*(l') \phi_{nk\sigma}(l') \phi_{n'k+Q\sigma}(l). \quad (142)$$

En este caso, el sistema de ecuaciones acopladas que nos lleva de $\chi_{\sigma}^{(0)}(Q; l, l')$ a $\chi_{\sigma}(Q; l, l')$

es

$$\begin{aligned} \sum_m \sum_n [\delta_{l,m} \delta_{m,n} - \chi_1^{(0)}(Q, l, m) U_m \chi_1^{(0)}(Q, m, n) U_n] \chi_1(Q, n, l') = \\ \chi_1^{(0)}(Q, l, l') + \sum_m \chi_1^{(0)}(Q, l, m) U_m \chi_1^{(0)}(Q, m, l'), \\ \sum_m \sum_n [\delta_{l,m} \delta_{m,n} - \chi_1^{(0)}(Q, l, m) U_m \chi_1^{(0)}(Q, m, n) U_n] \chi_1(Q, n, l') = \\ \chi_1^{(0)}(Q, l, l') + \sum_m \chi_1^{(0)}(Q, l, m) U_m \chi_1^{(0)}(Q, m, l'), \end{aligned} \quad (143)$$

formalmente idénticas a (131) sólo que ahora $l, l', m, n = 1, \dots, n_c$.

Una ventaja de usar esta representación resulta aparente al considerar las ecuaciones acopladas a resolver (131). Dichas ecuaciones implican resolver n_c sistemas de ecuaciones

lineales en Nn_c incógnitas. En contraste, las ecuaciones en $\chi_\sigma^{(o)}(Q; l, l')$ y $\chi_\sigma(Q; l, l')$ (143) implican resolver Nn_c sistemas de ecuaciones lineales en n_c incógnitas, donde por lo general $N \gg n_c$. Además, puede que sea suficiente, según el caso, calcular $\chi_\sigma(Q; l, l')$ para ciertas Q escogidas, de las cuales el comportamiento para Q arbitraria se puede inferir.

Cualquier función $F(Q; l)$ con la periodicidad de la superred se puede expandir en término de las g 's definidas en (117), i.e.

$$F(Q; l) = \sum_g F(Q; g) e^{igl}, \quad (144)$$

de donde

$$F(Q; g) = \frac{1}{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} F(Q; l) e^{-igl}. \quad (145)$$

Esta última transformación nos permite expresar ec. (138) en el espacio de vectores de onda como

$$\Delta_{Q; g} = \sum_g \chi_\sigma(Q; g, g') h_{Q; g'} \quad (146)$$

con

$$\chi_\sigma(Q; g, g') = \frac{1}{n_c} \sum_{l, l'} \chi_\sigma(Q; l, l') e^{-i(gl - g'l')}. \quad (147)$$

De aquí, encontramos

$$\chi_\sigma^{(o)}(Q, g, g') = Nn_c \sum_{nn'} \sum_k \left(\frac{f_{nk+Q\sigma} - f_{n'k\sigma}}{\epsilon_{nk+Q\sigma} - \epsilon_{n'k\sigma}} \right) M_{n'n'k\sigma}^{nk+Q}(g, g') \quad (148)$$

donde hemos definido los elementos de matriz

$$M_{n'n'k\sigma}^{nk+Q}(g, g') = \sum_{g''} \xi_{nk+Q\sigma}(g'' + g) \xi_{n'k\sigma}^*(g'') \xi_{n'k+Q\sigma}^*(g'' + g') \xi_{n'k\sigma}(g''), \quad (149)$$

siendo $\xi_{nk\sigma}(g)$ el g 'esimo coeficiente de la expansión de las funciones $\phi_{nk\sigma}(l)$, i.e.

$$\phi_{nk\sigma}(l) = \sum_g \xi_{nk\sigma}(g) e^{igl}. \quad (150)$$

Si sobre la superred se aplica un campo externo con variación espacial de la forma $\exp[i(Q + g)l]$, entonces la susceptibilidad de espín en la representación de vector de onda

$$\chi(Q; g, g') = \frac{1}{2}[\chi_1(Q; g, g') + \chi_1(Q; g, g')] \quad (151)$$

da la componente de Fourier la densidad de espín inducida con variación espacial $\exp[i(Q + g')l]$. En el límite en que la superred tiende al caso uniforme, $\chi(Q; g, g')$ es diagonal en g y g' . Si denotamos por $\chi(K)$ la susceptibilidad de espín de un material homogéneo, con $-\pi \leq K \leq \pi$, entonces en este límite

$$\chi(Q + g) = \chi(Q; g, g). \quad (152)$$

Si el sistema no es uniforme, entonces en general tendremos elementos fuera de la diagonal no nulos. Sin embargo, podemos graficar la parte diagonal de la susceptibilidad contra $Q+g$, y obtener un buen cuadro de como la estructura de la superred modifica la respuesta del sistema respecto al caso del material uniforme. En lo que resta de este trabajo trabajaremos en este esquema extendido, para mostrar ya sea la susceptibilidad o las energías como funciones del vector de onda.

X Resultados y Discusión.

a Parámetros y Cálculo Numérico.

Antes de pasar a presentar los resultados de este modelo, haremos una breve descripción de como se han realizado los cálculos.

Nuestra superred consta de un arreglo periódico de celdas unitarias, cada una compuesta de n_A átomos de "material" homogéneo A y n_B átomos de "material" homogéneo B . En el caso de un sistema formado de un sólo tipo de átomos, los parámetros del modelo son la razón U/τ (se toma a τ como unidad de energía), y la densidad promedio total de electrones por sitio, o "llenado". Llenado medio implica una densidad ρ promedio por sitio igual a 1, y $2K_F = \pi$. Para ρ arbitraria, $2K_F = \rho\pi$, de modo que si ρ es un número irracional, la longitud de onda de la ODE es incommensurable respecto al periodo de la red de átomos.

Como parámetros para la superred tenemos:

1) Los parámetros U_A, τ_A, U_B, τ_B (de los cuales sólo tres son estrictamente independientes, pues el cuarto se puede tomar como unidad de energía). Para el parámetro τ_{AB} tomamos simplemente la media aritmética de τ_A y τ_B .

2) ρ_A y ρ_B , las densidades promedio totales por sitio y por espín para los materiales A y B . Esto implica que, con todo los demás parámetros fijos, la diferencia de potencial entre los dos materiales se ajusta para cada temperatura. La razón por la que escogemos estos parámetros es que con dicha elección, para toda temperatura y tamaño de la celda unitaria, en cada material habrá una competencia entre la tendencia a formar una ODE con el vector de onda $2K_F$ correspondiente al límite homogéneo y las restricciones de simetría impuestas por la geometría de la superred. En este trabajo estamos interesados en investigar esta

competencia.

El problema de valores propios (112) se tiene que resolver junto con la condición de autoconsistencia (113), y la restricción de que el número total de electrones en cada material tenga el número prefijado. Luego, el cálculo implica el uso de dos parámetros de tolerancia:

Un parámetro controla la condición de autoconsistencia propiamente dicha, *i.e.* que tanto las densidades que entran en el potencial efectivo difieren de las densidades calculadas con la estructura electrónica asociada a dicho potencial efectivo. En cada iteración el potencial químico se ajusta de manera que el número total de electrones en la celda unitaria de la superred tenga el valor

$$\sum_{i=1}^{n_c} \langle \eta_{i1} \rangle + \langle \eta_{i2} \rangle = 2(n_A \rho_A + n_B \rho_B). \quad (153)$$

El segundo parámetro de tolerancia controla que tanto el número de electrones en cada material difiere de los valores prefijados

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_A} \langle \eta_{i1} \rangle + \langle \eta_{i2} \rangle &= 2n_A \rho_A \\ \sum_{i=n_A+1}^{n_c} \langle \eta_{i1} \rangle + \langle \eta_{i2} \rangle &= 2n_B \rho_B, \end{aligned} \quad (154)$$

que se obtienen ajustando la diferencia de potencial entre ambos materiales.

La forma eficiente de hacer el cálculo es empezar con tolerancias grandes y disminuir gradualmente ambas. En gran medida, el problema es análogo a encontrar numéricamente el mínimo de una superficie (la energía libre) definida en el espacio de parámetros del modelo. Así como una superficie puede tener varios mínimos locales y/o extremos que corresponden a máximos o puntos silla, en nuestro modelo se pueden obtener diferentes

soluciones autoconsistentes dependiendo de las densidades iniciales. Hay al menos dos criterios para discriminar entre dichas soluciones. Uno es la estabilidad de la solución ante pequeñas perturbaciones, que implica calcular la susceptibilidad magnética de la superred (una solución estable debe necesariamente tener asociada una susceptibilidad positiva). El otro criterio utiliza el valor de la energía libre total asociada a cada solución, que calculamos directamente de la expresión

$$F = \sum_{nk\sigma} (\epsilon_{nk\sigma} - \mu) f_{nk\sigma} + k_B T (f_{nk\sigma} \log[f_{nk\sigma}] + (1 - f_{nk\sigma}) \log[1 - f_{nk\sigma}]), \quad (155)$$

donde el término en la temperatura no es más que la expresión usual para la entropía de un sistema cuántico. En el caso en que para una temperatura se encuentren dos o más soluciones autoconsistentes, se escoge aquella con menor energía libre.

Una vez obtenida la estructura electrónica, se procede a calcular las susceptibilidades $\chi_i^{(o)}(Q; l, l')$ y $\chi_i^{(o)}(Q; l, l')$ usando la expresión (142). Idealmente, uno quisiera obtener el límite en que el número total de celdas unitarias N tiende a infinito. Si renormalizamos las funciones de Wannier como $\bar{\phi}_{nk\sigma}(l) = \sqrt{N} \phi_{nk\sigma}(l)$, entonces, en el límite en que $N \rightarrow \infty$ las amplitudes $\{\bar{\phi}_{nk\sigma}\}$ son finitas, y la ecuación (142) toma la forma

$$\chi_{\sigma}^{(o)}(Q; l, l') = \frac{n_c}{2\pi} \sum_{n, n'} \int_{-\pi/n_c}^{\pi/n_c} dk \left(\frac{f_{nk\sigma} - f_{n'k+Q\sigma}}{\epsilon_{nk\sigma} - \epsilon_{n'k+Q\sigma}} \right) \bar{\phi}_{nk\sigma}^*(l) \bar{\phi}_{n'k+Q\sigma}^*(l') \bar{\phi}_{nk\sigma}(l') \bar{\phi}_{n'k+Q\sigma}(l). \quad (156)$$

Ahora bien, en la práctica uno calcula la estructura para cierto número razonable N de puntos k . Se puede entonces descomponer la integral sobre k como una suma de N integrales cuyos límites de integración corresponden a los valores de k para los cuales la estructura se calcula, y extrapolar para los puntos intermedios las energías y elementos de matriz que aparecen en el integrando. Ello permite aumentar el número de puntos

reticulares k al integrar numéricamente cerca de la regiones donde el integrando presenta un comportamiento singular sin necesidad de calcular explícitamente los autovalores y funciones de onda autoconsistentes para cada k adicional que se quiera incluir. Hacer esto conlleva un ahorro de espacio y de tiempo.

Para temperaturas bajas ($k_B T \ll$ energía de Fermi) se requiere especial cuidado para los términos que involucran transiciones entre estados cerca del nivel de Fermi. Para dichos puntos el comportamiento del integrando es singular conforme $T \rightarrow 0$.

Una vez calculadas $\chi_i^{(o)}(Q; l, l')$ y $\chi_j^{(o)}(Q; l, l')$, se procede a obtener $\chi_1(Q; l, l')$ y $\chi_1(Q; l, l')$ resolviendo el sistema de ecuaciones acopladas (143). El problema equivale a invertir una matriz de $n_c \times n_c$ para cada Q . A la temperatura crítica, la matriz se hace singular para alguna Q . Alrededor de dicha temperatura se tienen susceptibilidades grandes ($U_1 \chi(Q; l, l) \gg 1$), lo que puede causar problemas de convergencia en la solución autoconsistente, pues pequeñas fluctuaciones en la densidad pueden traducirse en cambios considerables en el potencial efectivo.

b Resultados.

En las figuras {1.a}-{1.d} mostramos gráficas de $[\chi^{(o)}(K)]^{-1}$ en el límite homogéneo, en el que tenemos un sólo tipo de material en el estado paramagnético. En todos los casos, $\tau = 2eV$, que se puede tomar como la unidad de energía si se quiere. Una densidad total $\langle n \rangle = 1$ corresponde a llenado medio, en cuyo caso el estado base presenta un ordenamiento ferromagnético simple, aun en el tratamiento exacto [52]. Como la condición para la formación de la ODE es simplemente $[\chi^{(o)}(K)]^{-1} = U$, de las gráficas se puede extraer información concerniente a la relación entre el parámetro U , la temperatura de

transición T_c , y el vector de onda de la ODE K_{ODE} . Considérese por ejemplo el caso $\langle n \rangle = 0.73$. De las gráficas se puede inferir que para $U = 8eV$ la fase paramagnética es estable a la temperatura $k_b T = 2.0eV$, inestable para $k_b T = 1.0eV$, y que la inestabilidad ocurre para $K_{ODE} = \pi$. Con $U = 6eV$, la transición ocurre entre $k_b T = 0.25eV$ y $k_b T = 0.5eV$, con $K_{ODE} \simeq 2K_F$. Por otro lado, a bajas densidades, valores grandes de U tienden a favorecer fases puramente ferromagnéticas. En todos los casos, conforme U disminuye la temperatura crítica disminuye y $K_{ODE} \rightarrow 2K_F$.

En las figuras {2.a} y {2.b} mostramos $[\chi^{(0)}(Q; g, g)]^{-1}$ para dos superredes de electrones no interactuantes, i.e. $U_A = U_B = 0$. En ambos casos $\tau_A = \tau_B = 2eV$. La barrera de potencial entre ambos materiales y el potencial químico se ajustan de modo que la densidad promedio en cada material toma los valores prefijados $\langle n_A \rangle = 0.73$ y $\langle n_B \rangle = 0.55$, que en el límite homogéneo corresponden a las figuras {1.c} y {1.b} respectivamente. Las "mini-bandas" de energías para cada caso se muestran debajo de las gráficas de la susceptibilidad, y la línea horizontal indica el nivel de Fermi. En las gráficas de la energía mostramos $\epsilon(2K)$ contra K , con $K = Q + g$ en el esquema extendido discutido anteriormente.

En la figura {2.a} la celda unidad contiene 9 átomos del tipo A y 8 átomos del tipo B . El máximo absoluto de $\chi^{(0)}(Q; g, g)$ ocurre a vector de onda $Q + g = 2K_F$, con K_F el vector de onda de Fermi de la estructura de la superred en el esquema extendido. Las líneas verticales punteadas indican $2K_F^{(A)}$ y $2K_F^{(B)}$, con $K_F^{(A)}, K_F^{(B)}$ los vectores de onda de Fermi de los materiales A y B respectivamente. De la figura es claro que en este caso la superred se comporta como un nuevo material, sin una relación obvia con las propiedades de los materiales constituyentes considerados por separado. Así mismo, resaltan los máximos

locales a múltiplos de $g = 2\pi/n_c$ de la singularidad dominante en $\chi^{(a)}(Q; g, g)$. Dicha estructura proviene a las transiciones de Umklapp, que conectan vectores de onda que difieren por vectores de la red recíproca de la superred.

En la figura {2.b} mostramos $[\chi^{(a)}(Q; g, g)]^{-1}$ para el caso en que tenemos 25 átomos de tipo A y 25 átomos del tipo B . En este caso observamos que la estructura dominante se da muy cerca de los vectores de onda $2K_F^{(A)}$ y $2K_F^{(B)}$, y la respuesta de la superred sugiere una simple superposición de la respuesta de sus constituyentes. Los máximos satélites de Umklapp se agrupan ahora alrededor de los dos picos dominantes, y la estructura alrededor del vector de onda de Fermi de la superred ha prácticamente desaparecido. El que éste es un caso en el que cada material guarda su 'identidad', se corrobora en la figura {3}, donde mostramos las densidades electrónicas \uparrow y \downarrow en el estado base de dicha superred, para diferentes valores de $U \neq 0$. Por claridad, en la figura se interpolan los valores en los sitios de la red. En la figura {4} mostramos la transformada de Fourier de la densidad de espín para el caso $U = 8$, donde se aprecian los máximos muy cerca de $2K_F^{(A)}$ y $2K_F^{(B)}$, indicados por las líneas verticales.

A continuación pasamos a discutir dos ejemplos a detalle, que ilustran el comportamiento de nuestra superred modelo como función de la temperatura una vez que se introduce la interacción electrónica. En la figura {5} mostramos la variación con la temperatura de la densidad de electrones \uparrow y \downarrow , para una superred con los mismos parámetros que la correspondiente a la figura {2.a}, excepto que ahora tenemos electrones interactuantes con $U_A = U_B = 6$. Con dicha elección, el único parámetro que diferencia ambos "materiales" es su densidad promedio. En las figuras, los 9 primeros sitios corresponden al material A , y los últimos 8 al material B .

En este caso encontramos una única transición cerca de $\beta = [k_B T]^{-1} = 2.43\text{eV}^{-1}$. Conforme enfriamos el sistema debajo de la temperatura correspondiente a dicho valor de β , se forma una onda de espín en la superred. En la figura {6} mostramos la correspondiente evolución de las energías para ambas poblaciones de espín. Nótese que conforme baja la temperatura, la estructura de "mini-bandas" y el potencial químico se reajustan de manera que conforme $T \rightarrow 0$, el nivel de Fermi queda en una de las brechas de las energías. Dicho comportamiento se da recurrentemente en este modelo, y se puede ver como una forma que tiene el sistema de eliminar singularidades debido a transiciones entre estados en el nivel de Fermi. Nótese también que a la temperatura más baja ($\beta = 1000\text{eV}^{-1}$), los electrones \uparrow ocupan una banda más que los electrones \downarrow , lo que implica un momento magnético neto en la celda unitaria.

Asociada a la transición a la fase magnética, se da una divergencia notable en la susceptibilidad de espín $\chi(Q; g, g)$. En la figura {7} graficamos $\chi(Q; g, g)$ contra $Q + g$ para temperaturas alrededor del punto de transición. Durante la transición los máximos asociados a las transiciones de Umklapp acompañan a la divergencia para $K = 2K_F$.

En nuestro segundo ejemplo usamos los mismos parámetros que en el caso anterior, pero ahora fijamos $U_A = U_B = 8\text{eV}$. En las figuras {8} y {9} mostramos la variación con la temperatura de las densidades para ambas direcciones de spin. En contraste con el ejemplo anterior, en este caso distinguimos tres reordenamientos magnéticos. Para $\beta \simeq 0.8\text{eV}^{-1}$, observamos un ordenamiento antiferromagnético en el material A . Como vamos a mostrar más adelante, en esta transición la susceptibilidad de espín de la superred presenta una fuerte singularidad en $K = \pi$. A dicho vector de onda el material A por si sólo es inestable

en su estado paramagnético, como se puede apreciar en la figura {1.c}. Debajo de la temperatura crítica, el momento magnético en el material *A* por sitio crece considerablemente en un intervalo de temperaturas pequeño, mientras que en el material *B* aparecen oscilaciones del tipo RKKY.

Conforme la temperatura de la superred disminuye aun más, la magnetización por sitio en el material *A* se satura, y la amplitud de las oscilaciones en el material *B* crece gradualmente. En este intervalo de temperaturas la variación de la susceptibilidad de espín es gradual y no presenta singularidades. El ordenamiento magnético en el material *B* parece más bien inducido por los espines del material *A*.

Alrededor de $\beta = 2.0$ hay un reordenamiento magnético que afecta a toda la superred. En dicha región, la susceptibilidad presenta un comportamiento dramático y las densidades autoconsistentes obtenidas resultan muy sensibles a pequeños cambios en los parámetros del sistema; es como si el sistema no supiera bien a bien que configuración tomar. Para $\beta > 2.2$, se tiene de nuevo un comportamiento estable, y finalmente, en $\beta \simeq 3.5$, hay un tercer reordenamiento que discutiremos más adelante.

En la figura {10} mostramos el comportamiento de $\chi(Q; g, g)$ como función de la temperatura en la vecindad de $\beta = 0.8$, donde la primera inestabilidad se forma a $Q = \pi$. Al enfriar el sistema debajo de esta transición, el máximo de la susceptibilidad se desplaza de $Q = \pi$ hacia $(Q + g) \simeq 2K_F$, donde de nuevo se obtiene un comportamiento singular alrededor de $\beta = 2.0$, tal como se aprecia en la figura {11}. Dicho comportamiento de la susceptibilidad sugiere que en la formación de la onda de espín a bajas temperaturas intervienen dos inestabilidades a vectores de onda $Q = \pi$ y $Q = 2K_F$, lo que se refleja en la complejidad del ordenamiento magnético en espacio real.

Al bajar la temperatura aun más, se produce otro reordenamiento magnético entre $\beta = 3.40$ y $\beta = 3.60$, como se aprecia en las figuras {12.ab}. En dichas figuras mostramos por claridad una película de material *B* junto con sus dos películas de material *A* adyacentes. Si se analiza con cuidado la configuración de espín antes y después de la transición, se podrá observar que el reordenamiento afecta principalmente a los 3 últimos sitios de la película *B*, y que en dichos sitios se da la contribución principal al momento magnético total en la celda unitaria de la superred. Luego, a $\beta = 3.40$, se tiene un momento magnético total en la dirección \uparrow , mientras que a $\beta = 3.60$ el momento magnético apunta en la dirección opuesta. En las figuras {12.cd} mostramos el cambio correspondiente en las energías al pasar por la transición, donde se aprecia claramente la inversion en la ocupación de los espines. Esta transición no esta acompañada de singularidades en $\chi(Q; g, g')$.

El lector puede en este momento preguntarse con razón cómo es que hablamos del cambio en el signo del momento total siendo que el cálculo es esencialmente degenerado ante el intercambio $\uparrow \leftrightarrow \downarrow$, i.e. para ésta y todas las transiciones hemos hecho un elección aparentemente arbitraria al escoger como etiquetar a cada población de espín. La respuesta es que con nuestra elección, hemos querido enfatizar la posibilidad interesante de que en un modelo itinerante se dé el evento de un momento magnético localizado que a cierta temperatura se "frustra" y reorienta subitamente como respuesta a pequeños rearrreglos de sus alrededores.

Con todo lo anterior en mente, mostramos en la figura {13} el momento magnético total promedio por sitio como función de la temperatura, definido como

$$\langle M \rangle = \frac{1}{n_c} \sum_{l=1}^{n_c} (\eta_{l1} - \eta_{l2}), \quad (157)$$

para los dos ejemplos discutidos arriba. Para $U = 6eV$ hay un crecimiento gradual y monótono del momento magnético a partir de la temperatura de transición. Para $U = 8eV$ el comportamiento es más complejo. Al pasar por la primera transición en $\beta = 0.8$, el momento magnético neto permanece casi nulo. Sin embargo, después de la segunda transición crece rápidamente conforme la temperatura disminuye. Poco antes de saturarse, el momento magnético total sufre un cambio de signo abrupto a $\beta = 3.5$, que corresponde al rearreglo de los espines discutido arriba. En el presente modelo, la formación de un momento magnético neto en la celda unitaria es una característica exclusiva de la superred.

Para concluir esta sección quisiéramos comentar un poco acerca de la notable sensibilidad que muestra nuestro modelo al valor del parámetro de interacción U , así como de ciertos aspectos cualitativos importantes.

Antes que nada, recordemos que U es la energía de repulsión que dos electrones de espín opuesto sienten cuando coinciden en un mismo sitio. Esta repulsión determina que haya una competencia entre el término de energía cinética y el término de interacción. Debajo de la temperatura crítica, el sistema minimiza su energía libre formando una ODE que rompe la simetría traslacional, y se abren brechas en el espectro de energía de los electrones a $k \simeq \pm K_F$. Evidentemente, a $T = 0^\circ K$ el tamaño de la brecha es mayor a mayor valor de U , pero el vector de onda al que se abre la brecha y el tipo de ordenamiento espacial que se da (una onda de densidad de espín modulada por dos veces el vector de onda $2K_F$) depende poco del valor de U . Conforme la temperatura aumenta, mayor es la ocupación de los estados por arriba del nivel de Fermi, los que reducen la amplitud de la ODE, y por tanto, el tamaño de la brecha en el espectro de energías. La transición al estado

paramagnético es de segundo orden, pues la amplitud de la ODE y de la brecha tienden gradualmente a cero conforme el sistema se acerca a T_c por abajo. Como parámetro de orden de la transición se puede tomar simplemente la amplitud de la ODE.

La situación en el caso de la superred es muy diferente al caso homogéneo. De entrada, el espectro de energías de los electrones muestra brechas aún por arriba de la temperatura crítica, debido a la geometría de la superred. En el estado magnético la correspondencia entre la configuración de los momentos magnéticos en espacio real y el espectro de bandas de energía que se forma deja de ser obvia. Algunas de las brechas originales se pueden abrir más o menos después de la transición, según sea energéticamente más favorable ocupar o desocupar algunas de las mini-bandas de las dos poblaciones de espín. Los rearrreglos que se dan conforme se enfría el sistema dependen críticamente de U , y la simplicidad cualitativa del caso uniforme se pierde. Naturalmente, conforme el grosor de las películas de la superred se hace mayor, tiende a formarse en cada material una ODE correspondiente a la densidad electrónica local, y se recupera el límite uniforme. Nuestros resultados parecen indicar que los tamaños de las películas tienen que ser más bien grandes (varias longitudes de onda de Fermi) para que el sistema responda más como dos sistemas semi-infinitos que como una superred propiamente dicha.

XI Ondas de espín Helicoidales.

En esta última sección discutimos la posibilidad de generalizar el modelo presentado arriba para el caso en que el valor esperado del momento magnético por sitio apunte en cualquier dirección, por ejemplo ondas de densidad de espín de forma helicoidal, cónica, etc., pero con los electrones moviéndose en una dimensión.

En el modelo desarrollado en las secciones anteriores, el acoplamiento entre electrones de espín opuesto se da de manera indirecta a través de los potenciales efectivos que entran en las ecuaciones autoconsistentes (112), pero por lo demás, en las funciones de onda obtenidas el espín es un buen número cuántico. En el tratamiento campo medio de nuestro hamiltoniano básico

$$H^{(0)} = \sum_{l\sigma} [\epsilon_l c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma} - \tau_{l,l-1} c_{l-1\sigma}^\dagger c_{l\sigma} - \tau_{l,l+1} c_{l+1\sigma}^\dagger c_{l\sigma}] + \sum_l U_l \eta_l \eta_l, \quad (158)$$

se asumió que a cada estado electrónico correspondía una dirección definida de espín, i.e. \uparrow o \downarrow , respecto a cierta dirección de cuantización fija, por lo demás arbitraria. Dicha suposición se hizo implícitamente al hacer la aproximación de campo medio como

$$\eta_l \eta_l = c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} \simeq c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} > c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} + < c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow} > c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\uparrow} - < c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow} > < c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\uparrow} >, \quad (159)$$

que desacopla los operadores de campo para la coordenada de espín.

Sin embargo, considérese alternativamente hacer la aproximación de campo medio como sigue

$$\begin{aligned}
c_{i1}^\dagger c_{i1} c_{i1}^\dagger c_{i1} &= \frac{1}{2} (c_{i1}^\dagger c_{i1} + c_{i1}^\dagger c_{i1} - c_{i1}^\dagger c_{i1} c_{i1}^\dagger c_{i1} - c_{i1}^\dagger c_{i1} c_{i1}^\dagger c_{i1}) \\
&\approx \frac{1}{2} (c_{i1}^\dagger c_{i1} + c_{i1}^\dagger c_{i1}) - \langle c_{i1}^\dagger c_{i1} \rangle c_{i1}^\dagger c_{i1} - \langle c_{i1}^\dagger c_{i1} \rangle c_{i1}^\dagger c_{i1} + \langle c_{i1}^\dagger c_{i1} \rangle \langle c_{i1}^\dagger c_{i1} \rangle,
\end{aligned}
\tag{160}$$

donde en el último paso reescribimos los productos de operadores $c_{i1}^\dagger c_{i1}$ y $c_{i1}^\dagger c_{i1}$ como la suma de sus valores esperados más fluctuaciones, y se desecharon los términos cuadráticos en éstas.

En el caso en que los valores esperados que aparecen en (160) son diferentes de cero, el eje de cuantización del espín de los electrones, determinado en la teoría de campo medio por la dirección local de la magnetización promedio, puede cambiar de sitio a sitio.

Para obtener el hamiltoniano de campo medio no basta simplemente expresar los productos de operadores de campo como la suma de su valor medio más fluctuaciones y despreciar términos cuadráticos en las fluctuaciones, pues la posibilidad de que los productos cruzados tengan valor esperado diferente de cero introduce cierta ambigüedad en la forma de hacerlo. La manera correcta de hacerlo es escribir la expresión para el valor esperado de la energía total, y aplicar el principio variacional de que éste sea un mínimo, sujeto a la restricción de que el número total de partículas se conserve. El procedimiento equivale a la aproximación usual de Hartree-Fock aplicada al caso de partículas que se mueven en una red discreta interactuando con un potencial de interacción del tipo delta de Dirac [56] [26]. El hamiltoniano de campo medio que se obtiene es

$$H_{MF} = \sum_{i\sigma} [\epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \tau_{i,i-1} c_{i-1\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \tau_{i,i+1} c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}]$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_l U_l \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle > c_{l1}^\dagger c_{l1} + \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle > c_{l1}^\dagger c_{l1} - \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle > c_{l1}^\dagger c_{l1} > \\
& - \sum_l U_l \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle > c_{l1}^\dagger c_{l1} + \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle > c_{l1}^\dagger c_{l1} - \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle > c_{l1}^\dagger c_{l1} > . \quad (161)
\end{aligned}$$

El procedimiento para diagonalizar este Hamiltoniano es el mismo que el descrito en la sección II, excepto que ahora las ecuaciones autoconsistentes mezclan amplitudes de Bloch de diferente espín. Para cada k en la primera zona de Brillouin de la superred, el problema de valores propios a resolver es de la forma

$$\sum_{l'=1}^{n_c} \sum_{\sigma'=\uparrow, \downarrow} T^{(k)}(l, l'; \sigma, \sigma') \phi_{nk}(l', \sigma') = \epsilon_{nk} \phi_{nk}(l, \sigma) \quad (162)$$

donde $n = 1, \dots, 2n_c$, pues la matriz a diagonalizar es ahora de $(2n_c) \times (2n_c)$, e incluye la coordenada de espín. La funciones de onda $\phi_{nk}(l, \sigma)$ se pueden tratar como un vector de dimensión $2n_c$, donde los índices nones corresponden a los estados \uparrow , y los índices pares a \downarrow . Los elementos no nulos de la matriz $T^{(k)}(l, l'; \sigma, \sigma')$ son

$$T^{(k)}(l, l; \uparrow, \uparrow) = \epsilon_l + U_l \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle \quad (163)$$

$$T^{(k)}(l, l; \downarrow, \downarrow) = \epsilon_l + U_l \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle \quad (164)$$

$$T^{(k)}(l, l+1; \sigma, \sigma) = -\tau_{l, l+1} e^{-ik} \quad (165)$$

$$T^{(k)}(l+1, l; \sigma, \sigma) = -\tau_{l+1, l} e^{ik} \quad (166)$$

$$T^{(k)}(l, l; \uparrow, \downarrow) = -U_l \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle \quad (167)$$

$$T^{(k)}(l, l; \downarrow, \uparrow) = -U_l \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle \quad (168)$$

con $\langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle = \langle c_{l1}^\dagger c_{l1} \rangle^*$.

Los operadores de campo están dados por

$$c_{l+m n_c \sigma} = \sum_{k, n} e^{ik(l+m n_c)} \phi_{nk}(l, \sigma) c_{nk} \quad (169)$$

y la condición de autoconsistencia es

$$\langle c_{l\sigma}^\dagger c_{\sigma'} \rangle = \sum_{k,n} \phi_{nk}^*(l, \sigma) \phi_{nk}(l, \sigma') f_{nk}, \quad (170)$$

con $f_{nk} = \langle c_{nk}^\dagger c_{nk} \rangle$ la función de distribución de Fermi evaluada en la energía ϵ_{nk} . Nótese que el espín ya no es una etiqueta de las energías propias, sino más bien una coordenada más de las funciones de onda. En lugar del espectro de n_c bandas para cada espín del caso anterior, ahora tenemos $2n_c$ bandas con estados que mezclan los espines, o espinores.

El significado físico de los valores esperados $\langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\sigma} \rangle$ sigue directamente de la expresión para el valor esperado del momento magnético total \mathbf{M}_l en segunda cuantización

$$\mathbf{M}_l = \sum_{\sigma, \sigma'} \langle l\sigma | \hat{x}\sigma_x + \hat{y}\sigma_y + \hat{z}\sigma_z | l\sigma' \rangle \langle c_{l\sigma}^\dagger c_{\sigma'} \rangle \quad (171)$$

con $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ las matrices de Pauli y tomamos la dirección $+z(-z)$ como $\uparrow (\downarrow)$. De esta expresión obtenemos

$$\begin{aligned} M_l^x &= 2\text{Re}(\langle c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow} \rangle) \\ M_l^y &= 2\text{Im}(\langle c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow} \rangle) \\ M_l^z &= \langle c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} \rangle - \langle c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} \rangle. \end{aligned} \quad (172)$$

Para ilustrar el tipo de ordenamientos magnéticos que se pueden dar en un sistema descrito por el Hamiltoniano (161), en las figuras {14}, {15}, y {16}, mostramos configuraciones del espín para diferentes valores del parámetro U , para un sistema homogéneo con ($\langle \eta_{l\uparrow} \rangle + \langle \eta_{l\downarrow} \rangle = .5$), que implica $2K_F = \pi/2$, i.e. un periodo de cuatro sitios de la red unidimensional. En cada figura se muestran cuatro posibles configuraciones de espín en unidades arbitrarias, que corresponden a cuatro soluciones autoconsistentes obtenidas

usando diferentes configuraciones iniciales. Las dos primeras corresponden a ondas de espín con polarización lineal, *i.e.* con el eje de cuantización fijo, y fueron obtenidas tomando la configuración inicial con $\langle c_{11}^\dagger c_{11} \rangle = 0$. En la tercera, la configuración inicial se tomó de forma helicoidal, en la que el momento neto cambia de dirección de sitio a sitio, pero con la magnitud fija. La cuarta se genera asignando una dirección y magnitud generadas al azar, con el número total de electrones correcto. Al pie de cada configuración se muestra la energía total correspondiente en eV (aquí, como en todo el trabajo, $\tau = 2eV$).

Para $U = 2eV$ (fig. {14}), las dos soluciones con polarización lineal son de energía ligeramente menor que la solución helicoidal, lo que es consistente con el hecho de que la configuración inicial arbitraria evoluciona a una configuración con polarización lineal. En contraste, para $U = 8, 16$ (figs. {15}, {16}) la solución helicoidal resulta de menor energía.

En la figura {17} mostramos la magnetización promedio para soluciones autoconsistentes con ordenamiento magnético helicoidal, para el caso de un sistema uniforme con $2K_F = \pi/4(\langle \eta_{11} \rangle + \langle \eta_{12} \rangle = .25)$, y diferentes valores de U . Nótese que conforme U aumenta, el ángulo de precesión del helicoide alrededor del eje vertical se hace más y más chico. En el límite $U \rightarrow \infty$, el estado base del sistema es ferromagnético simple.

En el caso de una superred, el tipo de configuraciones se complica bastante. Ello es en parte debido a que el modelo permite diferentes soluciones autoconsistentes muy cercanas en energías, lo que da lugar a cierta ambigüedad en la naturaleza del estado base. Como ejemplo, considérese la superred con $U_A = U_B = 8eV, n_A = 9, n_B = 8, \rho_A = .73, \rho_B = .55$, discutida en la sección anterior. En la figura {18} mostramos en perspectiva el momento magnético para dicha superred en el estado base. La figura corresponde a la misma configuración que mostramos en la figura {12.b}, tomando como la dirección de

cuantización el eje z . Con exactamente los mismos parámetros, calculamos el estado base de la superred, pero ahora permitiendo que el eje de cuantización cambie de sitio a sitio. En la figura {19} mostramos una de las soluciones autoconsistentes obtenidas, vista desde la misma perspectiva que la figura {18}. Aunque a primera vista se distingue poca relación entre ambas figuras, resulta que tanto la densidad total en cada sitio como la magnitud del momento magnético por sitio son bastante similares, como se puede apreciar en la tabla {1}. En la misma tabla damos la energía, que para todo fin práctico es la misma para ambas configuraciones. Los resultados sugieren que en éste caso la energía total, y por tanto, la configuración del estado base, dependen más que nada del momento total por sitio. Dependiendo de la solución con la que se inicie la iteración del cálculo autoconsistente, el sistema puede estabilizarse con diferentes disposiciones de las direcciones relativas de los momentos magnéticos entre sí.

XII Conclusiones. Parte II.

En esta parte de nuestro trabajo hemos desarrollado un modelo sencillo de superred magnética formada de "materiales" que en su estado base presentan un orden de tipo antiferromagnético modulado por dos veces su vector de onda de Fermi. Aun en el caso en que se consideran partículas no interactuantes, la geometría de la superred introduce una estructura muy rica en su susceptibilidad magnética. Mediante un ejemplo sencillo hemos ilustrado la forma en que las propiedades de la superred evolucionan conforme disminuye el ancho de su celda primitiva, y pasa del caso en que muestra una superposición simple de las propiedades de sus materiales constituyentes, al caso en que sus propiedades son distintas y sin una relación obvia con las propiedades de los materiales por separado.

Por medio de una teoría de campo medio y una descripción tipo RPA de su respuesta magnética, hemos presentado un estudio detallado de la dependencia con la temperatura de la estructura electrónica y estado base de dos ejemplos de nuestra superred modelo.

En el primer ejemplo, observamos una sola transición a un tipo de ordenamiento magnético que afecta a toda la celda primitiva de la superred. En el segundo ejemplo, en el que todos los parámetros se mantienen iguales que en el primer ejemplo con excepción del parámetro de repulsión coulombiana por sitio U , obtenemos un comportamiento muy diferente. Se observa primero una primera transición que afecta sólo a una de las películas, seguida de otras transiciones en las que se observan reordenamientos de los momentos magnéticos por sitio. Así mismo, encontramos que dichas transiciones van acompañadas de cambios en el momento magnético total de la celda primitiva de la superred. Ello sugiere la posibilidad de detectar reordenamientos en las configuraciones de espines de superredes

magnéticas midiendo el cambio en la magnetización total de las mismas como función de la temperatura. Tales reordenamientos han sido de hecho detectados en superredes construidas a base de tierras raras [36].

Finalmente, hemos considerado brevemente la posibilidad de que los momentos magnético apunten en direcciones arbitrarias, encontrado que el estado base de nuestro segundo ejemplo resulta más bien 'blando' ante reordenamientos en las direcciones de los espines, en el sentido de que los resultados sugieren que es la magnitud del momento magnético por sitio la que parece determinar la energía total de la configuración.

XIII Conclusiones Generales.

En la primera parte de este trabajo se desarrollo y aplicó un formalismo que permitió incluir de manera no trivial efectos de la cristalinidad y rompimiento de simetría en la contribución superficial a la respuesta óptica de metales cristalinos. La teoría predice efectos muy interesantes conectados al cambio en el campo local cerca de la superficie, y provee de mecanismos resonantes novedosos involucrados en los modos electromagnéticos superficiales. A través de la dependencia del acoplamiento dipolar de los primeros planos cristalinos respecto a la simetría de las diferentes caras cristalinas paralelas a la superficie, el modelo predice una dependencia significativa de la relación de dispersión de los modos respecto a la cara cristalina y, en el caso de caras de baja simetría como las Ag(110), respecto a la dirección relativa entre la superficie y la dirección de propagación de los plasmones de superficie. Aunque las relaciones de dispersión para el plasmón de superficie de la plata predicha por nuestro modelo no se ajusta a los experimentos realizados, los resultados obtenidos son importantes pues indican la importancia de incluir el efecto de campo local en modelos más refinados que se puedan implementar en el futuro.

En una segunda aplicación del modelo, encontramos un acuerdo notable entre nuestras predicciones y experimentos muy recientes de reflectancia diferencial en cristales de plata, en los cuales se mide el efecto de variar la dirección relativa entre el vector de polarización de campo eléctrico respecto a los planos (110) paralelos a la superficie. Consideramos que los resultados obtenidos representan un avance notable hacia el entendimiento de los procesos físicos que subyacen en los experimentos que involucran el cambio de propiedades dieléctricas cerca de las superficies. El formalismo es uno de los primeros esfuerzos aplicados

con éxito, y que incluye en un mismo modelo tanto la contribución de los electrones de conducción como de la red de iones a la respuesta óptica de los metales.

En la segunda parte del presente trabajo se implementó un modelo de superred magnética. En este caso el énfasis fue en estudiar el efecto de la modulación de la superred sobre la susceptibilidad de espín y estado base como función de la temperatura. La superred se construye a base de cadenas de Hubbard unidimensionales, que en la aproximación de campo medio, presentan como estado base una onda de densidad de espín modulada por dos veces el vector de onda de Fermi, modulación originada en el llamado fenómeno de anidamiento. La transición del estado no magnético al estado de onda densidad de espín esta caracterizada por una fuerte singularidad en la susceptibilidad estática de espín.

En el modelo de superred magnética estudiado, se tiene la interesante situación de un problema en el que intervienen al menos tres modulaciones espaciales que caracterizan al problema: Los vectores de onda de Fermi correspondientes a cada uno de los materiales, y la periodicidad de la superred. Dependiendo de la magnitud relativa de las diferentes periodicidades y de los parámetros que determinan la interacción electrónica en cada material, se pueden dar muy variadas situaciones. En el presente trabajo se tomaron dos ejemplos que consideramos ilustrativos de la riqueza en el tipo de ordenamientos magnéticos que se pueden obtener en las superredes magnéticas. Así mismo, se estudió en detalle la dependencia con la temperatura de la susceptibilidad de espín, que caracteriza las diferentes transiciones de fase.

En un contexto más general, creemos que el presente trabajo representa una importante

contribución al estudio del efecto del rompimiento de simetría sobre las propiedades físicas de los sistemas cristalinos.

PIES DE FIGURA PARTE II

Fig. (1): Gráficas del inverso de la susceptibilidad de espín no interactuante $\chi^{(o)}(K)$ para cadenas de Hubbard uniformes a diferentes llenados y temperaturas. Conforme la temperatura disminuye, se forma un mínimo agudo en $\chi^{(o)}(K)$ al vector de onda $2K_F$. Los vectores de onda se escalan de modo que conforme $T \rightarrow 0$, la abscisa del mínimo toma un valor numérico igual a la densidad total por sitio. Además, la ordenada de dicho punto determina la mínima U que hace la fase paramagnética inestable.

Fig.(2): Inverso de la susceptibilidad magnética $[\chi^{(o)}(Q;g,g)]^{-1}$ para una superred modelo de electrones no interactuantes. En las Fig.(2.a) tenemos 9 sitios con una densidad promedio por sitio $\langle n \rangle = 0.73$ (material A), y 8 sitios con $\langle n \rangle = 0.55$ (material B)). La línea a rayas vertical indica las posiciones de $2K_F^{(A)}$ y $2K_F^{(B)}$. Así mismo, debajo de la curva mostramos las energías de los estados de Bloch como función de los vectores de onda extendidos $Q + g$, con el potencial químico a $T = 0$ indicado por una línea horizontal. Un factor de escala de dos se introduce para enfatizar la posición del máximo en la susceptibilidad a dos veces el vector de Fermi de la superred $2K_F$. En la Fig. (2.b) los parámetros son idénticos a los de la Fig. (2.a) pero ahora se tienen veinte sitios de cada material. Mientras que el vector de onda de Fermi de la superred es el mismo que en el caso anterior, en este caso las transiciones de Umklapp muy cercanas a $2K_F^{(A)}$ y $2K_F^{(B)}$ dominan la respuesta del sistema.

Fig.(3): Aquí presentamos la densidad autoconsistente para las dos poblaciones de espín del estado base del ejemplo de superred modelo correspondiente a la Fig.(2.b), con 20 sitios de cada material. El valor de la densidad para cada espín se interpola entre los sitios para enfatizar el tipo sinusoidal de la onda de densidad de espín, tal como se espera en el caso de un sistema uniforme.

Fig. (4): Transformada de Fourier de la densidad de espín para el caso $U = 8$ de la Fig. (3), donde se aprecian los máximos muy cerca de $2k_F^{(A)}$ y $2k_F^{(B)}$, indicados por las líneas verticales.

Fig.(5): Aquí presentamos un secuencia ilustrando un ejemplo de transición magnética conforme la temperatura de nuestra superred modelo disminuye, con $\beta = [k_{\text{Boltz}}T]^{-1}$ en eV^{-1} . En las figuras mostramos la densidad electrónica promedio para los electrones con \uparrow (línea continua) y espín \downarrow (línea de punto y raya). El sistema tiene los mismos parámetros que los correspondientes a la Fig. (2.a) excepto que ahora se tienen electrones interactuantes con $U_A = U_B = 6\text{eV}$. Los primeros nueve sitios corresponden al material A y los últimos 8 al material B .

Fig. (6): Contraparte en el espacio de momentos de la secuencia presentada en las Fig. (5), donde usamos el esquema extendido para las energías descrito en el texto. Conforme la temperatura disminuye, las 'mini-bandas' \uparrow y \downarrow se diferencian entre sí, con la consiguiente repoblación de los estados electrónicos. Nótese que la posición del nivel de Fermi a $T \approx 0$ implica la existencia de un momento magnético total neto en la celda primitiva de la

superred.

Fig.(7): Parte diagonal de la susceptibilidad de espín total $\chi(Q;g,g')$ cerca de la temperatura de transición correspondiente a la transición ilustrada en las Figs. (5) y (6). La inestabilidad ocurre al vector de onda $2K_F$ de la superred (línea vertical a rayas). Los máximos de Umklapp parecen seguir la singularidad del máximo principal.

Fig.(8): Secuencia mostrando una transición magnética de un sistema con los mismos parámetros que los del ejemplo de las Fig. (5) y (6), excepto que ahora $U_A = U_B = 8eV$. El sistema sufre una primera transición alrededor de $T = 1.25eV$ ($\beta \simeq 0.8eV^{-1}$), temperatura debajo de la cual se forma un orden antiferromagnético en la película A. Conforme la temperatura disminuye aun más, se desarrolla también orden magnético en la película B.

Fig. (9): Conforme la temperatura del sistema mostrado en las Fig. (8) disminuye, se dan otros reordenamientos sutiles en las densidades electrónicas a las temperaturas correspondientes a $\beta \simeq 2.0 eV^{-1}$ y $\beta \simeq 3.5 eV^{-1}$. En el primer caso, el reordenamiento afecta a toda la celda primitiva de la superred, mientras que en la segunda transición se ven principalmente afectados los últimos tres sitios de la película B.

Fig.(10): Parte diagonal de la susceptibilidad de espín $\chi(Q;g,g')$ cerca de la temperatura crítica para el caso mostrado en la Fig.(6). La inestabilidad se da al vector de onda $K = \pi$. Ello es consistente con el comportamiento de la susceptibilidad inversa $[\chi^{(0)}]^{-1}$ correspondiente al material uniforme A mostrada en al Fig.(1.c), donde se puede apreciar

que para altas temperaturas el mínimo se corre de $2K_F^{(A)}$ a π .

Fig.(11): Parte diagonal de la susceptibilidad $\chi(Q;g,g')$ alrededor de la temperatura crítica correspondiente a la primera de las transiciones mostrada en la Fig.(9). El máximo en $\chi(Q;g,g)$ se corre hacia $2K_F$, donde se observa una fuerte singularidad cerca del punto donde los espines se rearreglan alrededor de $\beta \simeq 2eV^{-1}$. Conforme el sistema se enfria por debajo de la temperatura del segundo rearreglo de los espines ($\beta \simeq 3.5eV^{-1}$), la posición del pico se corre un poco a la derecha, pero no se observa ningun comportamiento singular.

Fig.(12): Detalle de segundo rearreglo de los espines correspondiente a la Fig. (9). Por claridad, en la figura mostramos una película de material *B* junto con las dos película de material *A* adyacentes. Nótese el caracter localizado del rearreglo de espines, que sólo afecta significativamente a los últimos tres sitios de material *B*. Mostramos también el cambio en las 'mini-bandas' de energía, donde se aprecia la reocupación en las poblaciones de espín al pasar por la transición.

Fig.(13): En la figura mostramos el momento magnético total por sitio en la celda primitiva de la superred $(1/n_c)\sum_i(n_{i1} - n_{i2})$ como función de β , para los ejemplos de superred modelo dicutido en este trabajo. Mientras que en el caso $U = 6eV$ se aprecia un crecimiento gradual en el momento magnético de la celda, para $U = 8eV$ se dan cambios abruptos en la magnitud y dirección del momento total.

Fig. (14): Diagrama de la onda de densidad de espín para cuatro posibles soluciones

autoconsistentes a $T = 0$ para una cadena de Hubbard con $U = \tau = 2eV$, y densidad total por sitio de 0.5 ($2K_F = \pi/4$). La última solución se obtuvo iniciando la iteración con una configuración generada al azar, y resulta idéntica a la de menor energía, que en este caso corresponde al primer diagrama. En el modelo las soluciones con polarización lineal el eje de cuantización del espín es arbitrario.

Figs. (15) y (16): Lo mismo que en el caso de la figura (14) pero para $U = 8$ y $U = 16eV$'s respectivamente. En ambos casos el ordenamiento cónico resulta de menor energía que las soluciones con polarización lineal. El ángulo del cono que describe la precesión del momento magnético tiende a cerrarse conforme U aumenta.

Fig. (17): Diagramas para soluciones cónicas de la onda de densidad de espín para tres sistemas con densidad total por sitio de 0.25 ($2K_F = \pi/8$) y diferentes U 's. Conforme $U \rightarrow \infty$, la solución tiende a un ordenamiento ferromagnético simple.

Fig. (18): Diagrama mostrando en perspectiva el momento magnético total por sitio correspondiente al estado base de la superred modelo descrita en las Figs. (8)-(12).

Fig. (19): Diagrama mostrando en perspectiva el momento magnético total por sitio correspondiente a la superred con exactamente los mismos parámetros que la superred modelo descrita en la Fig. (8)-(12), pero ahora permitiendo que el momento magnético cambie de dirección de sitio a sitio.

TABLAS.

Tabla (1). Comparación entre el valor de las diferentes componentes (M_x, M_y, M_z) y magnitud del momento magnético total (M_{tot}), así como de la densidad total por sitio (N_{tot}), para las dos soluciones autoconsistentes ilustradas en las Figs. (18) y (19). Al pie de la tabla damos los valores de los parámetros del cálculo.

Fig. 1

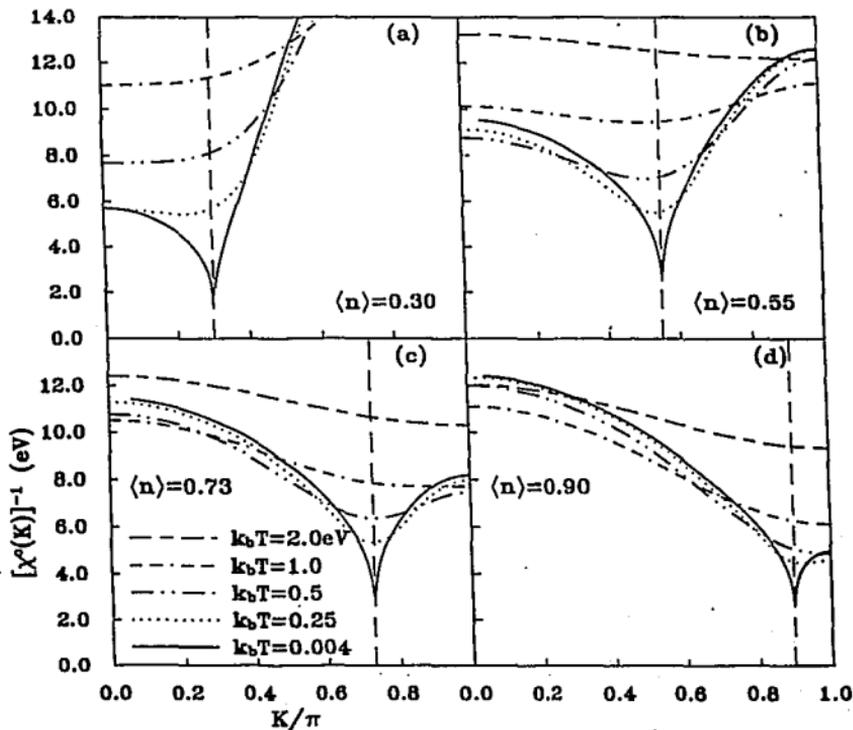
 $(\chi^e)^{-1}$ v.s. K (Homogeneous system)

Fig. 2

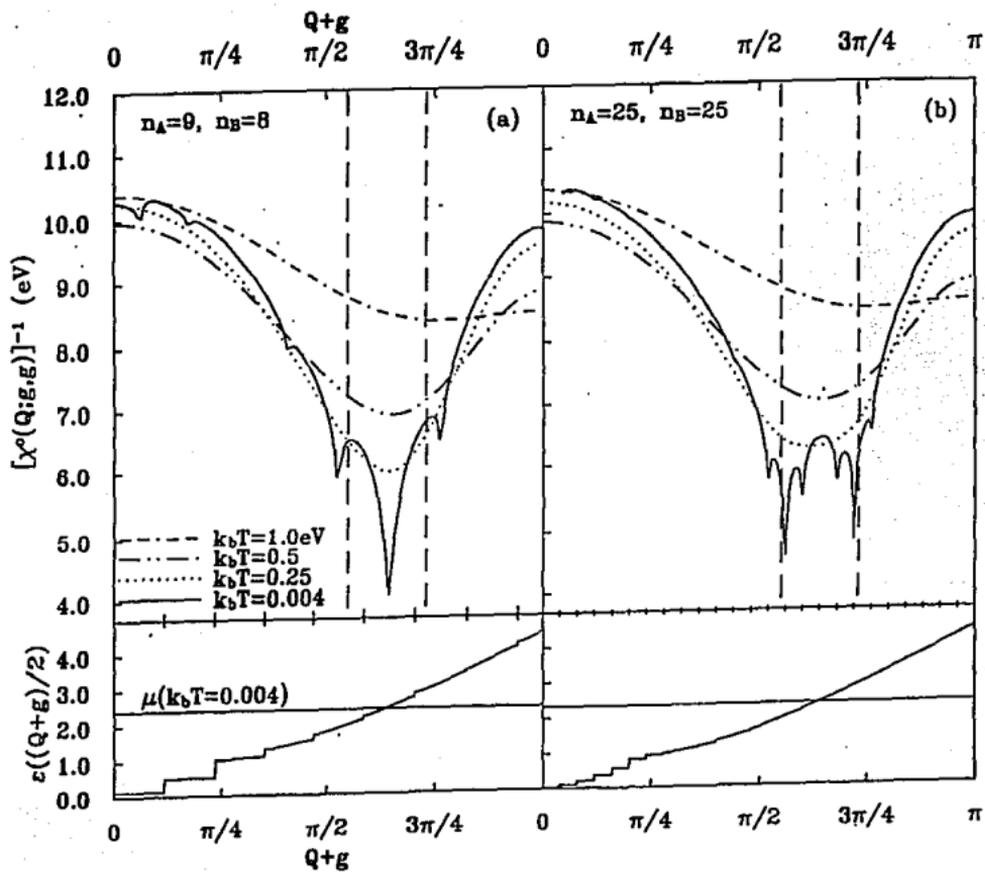


Fig. 3

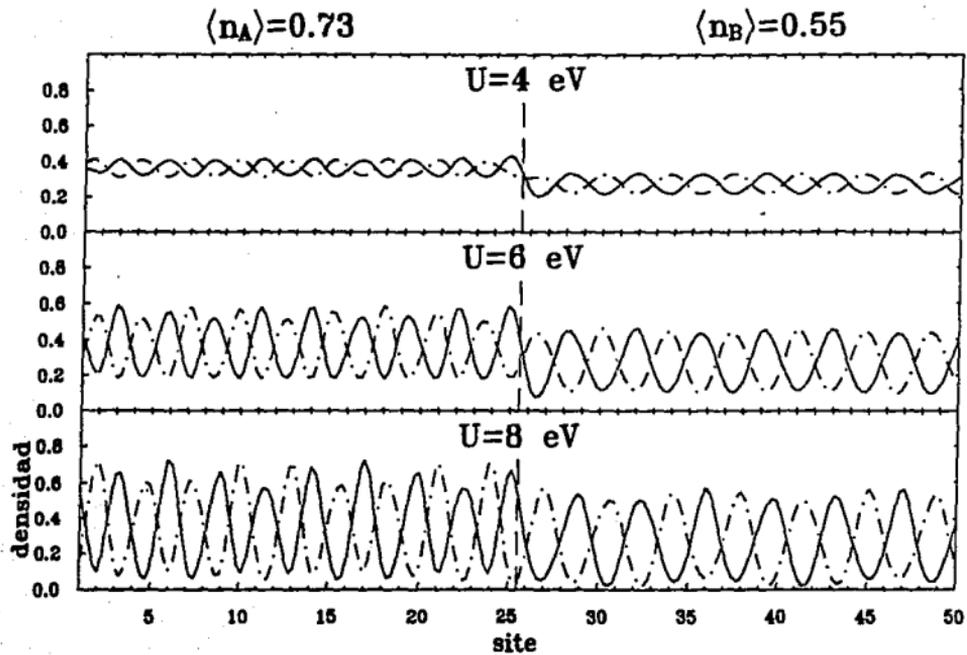


Fig. 4

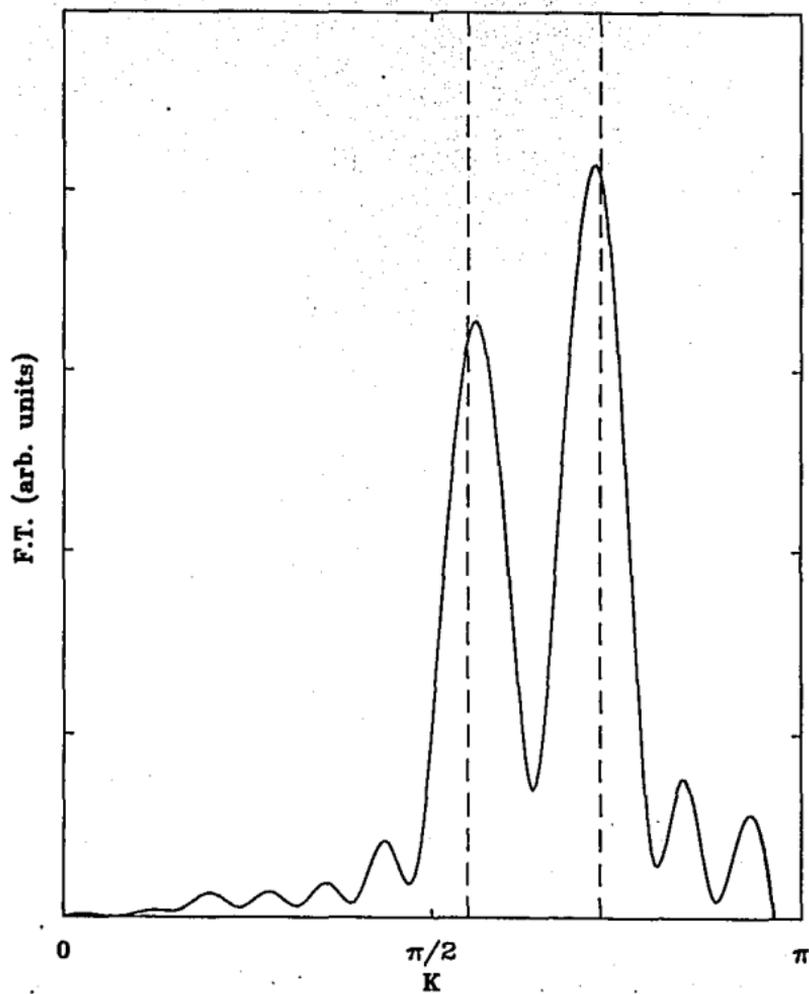


Fig. 5

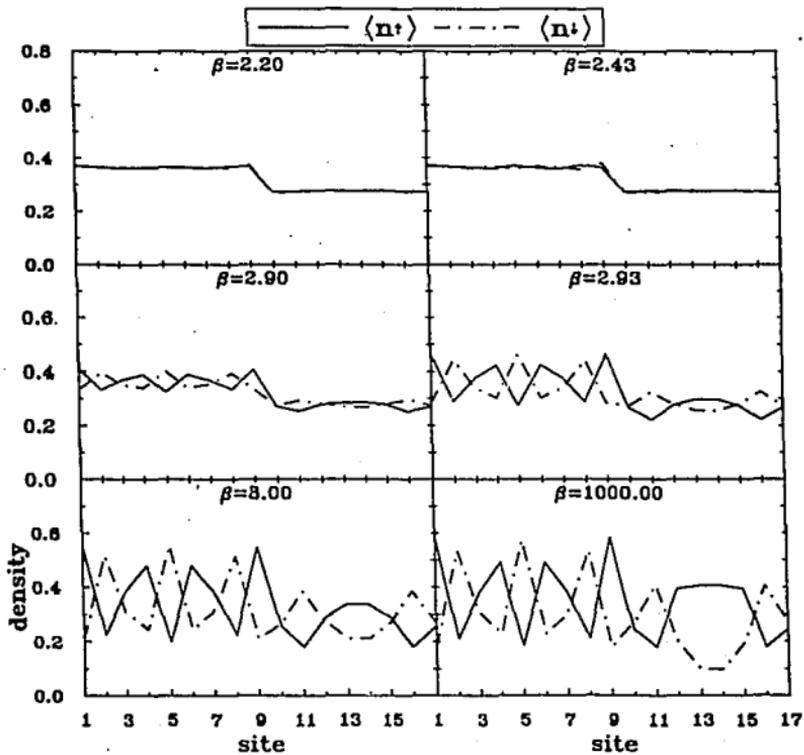


Fig. 6

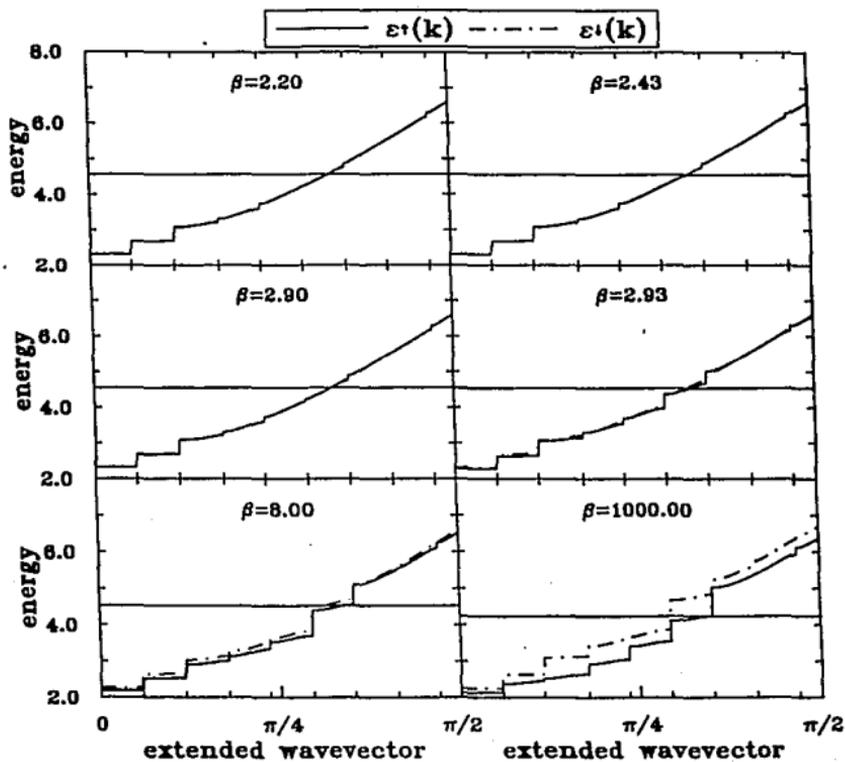


Fig. 7

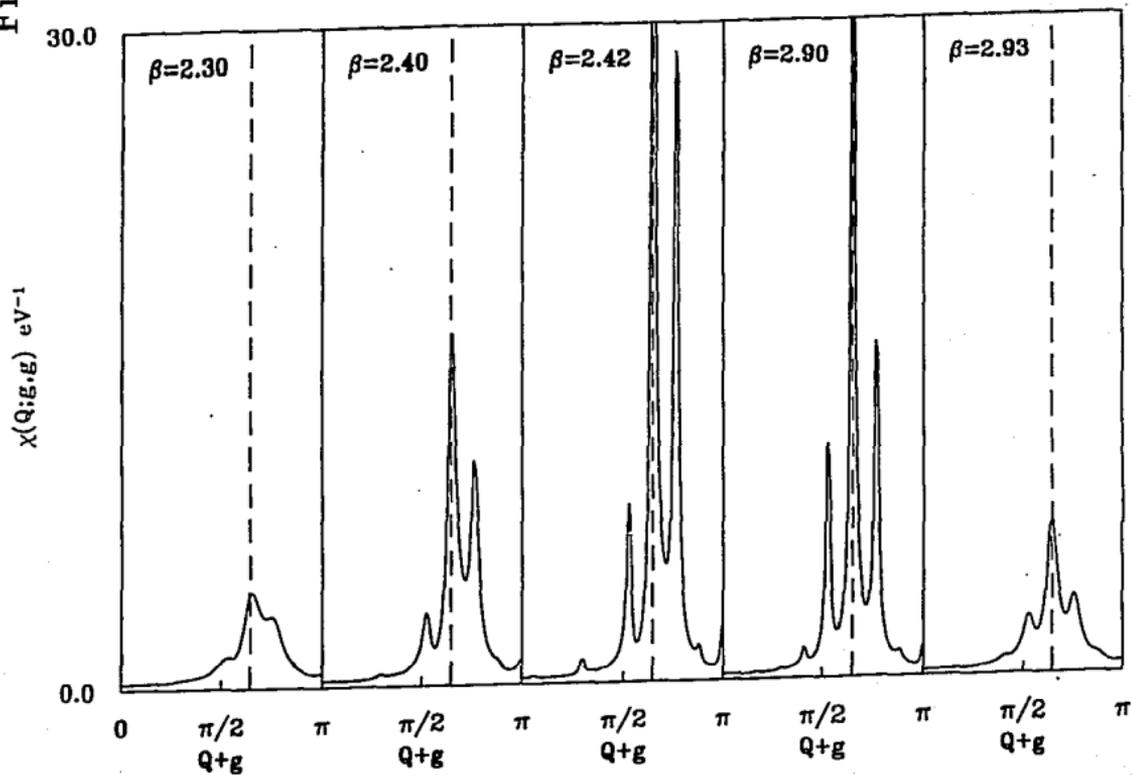


Fig. 8

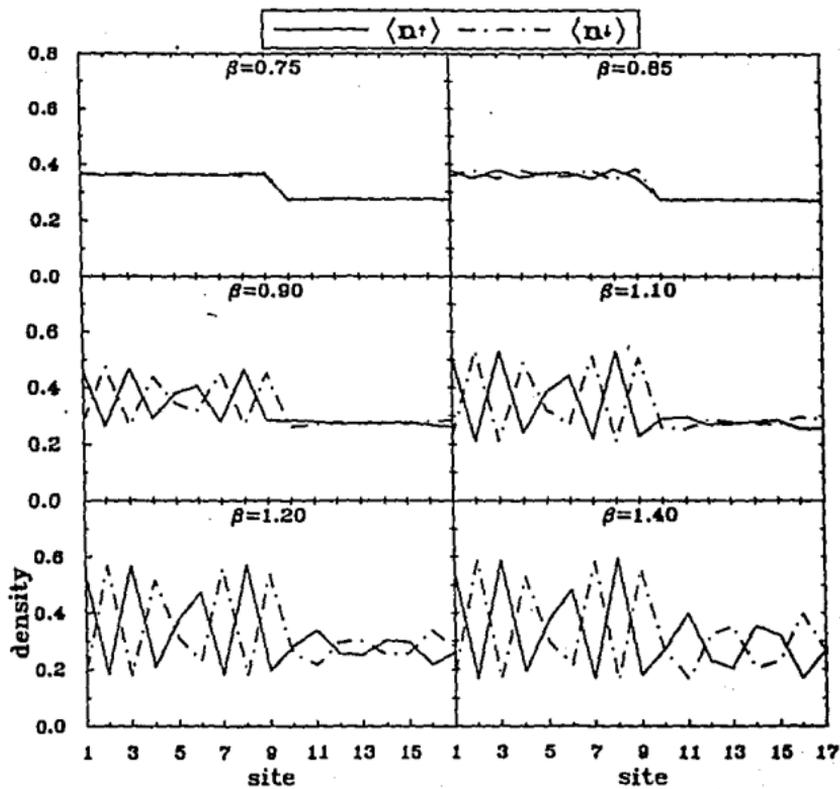


Fig. 9

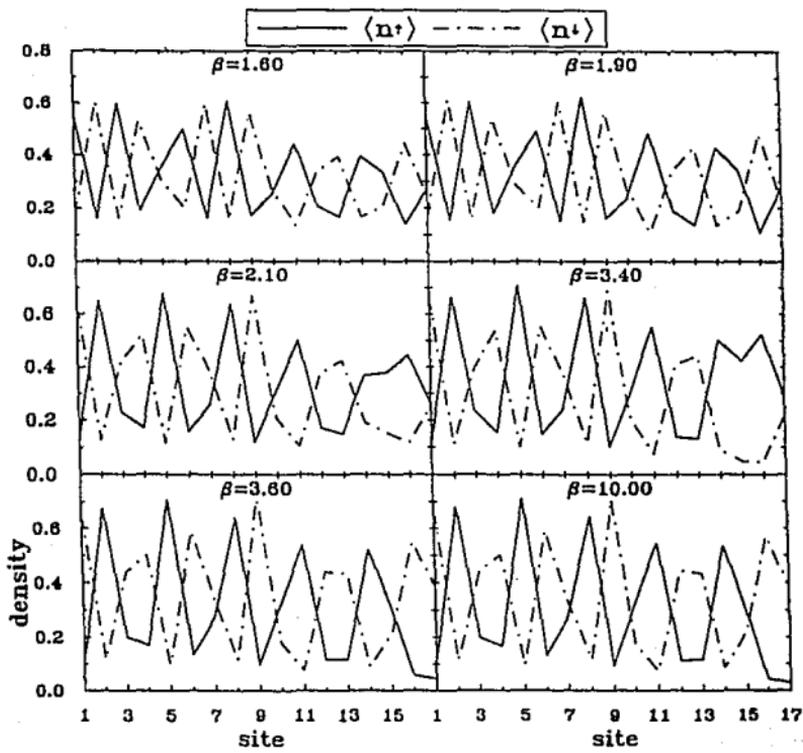


Fig. 10

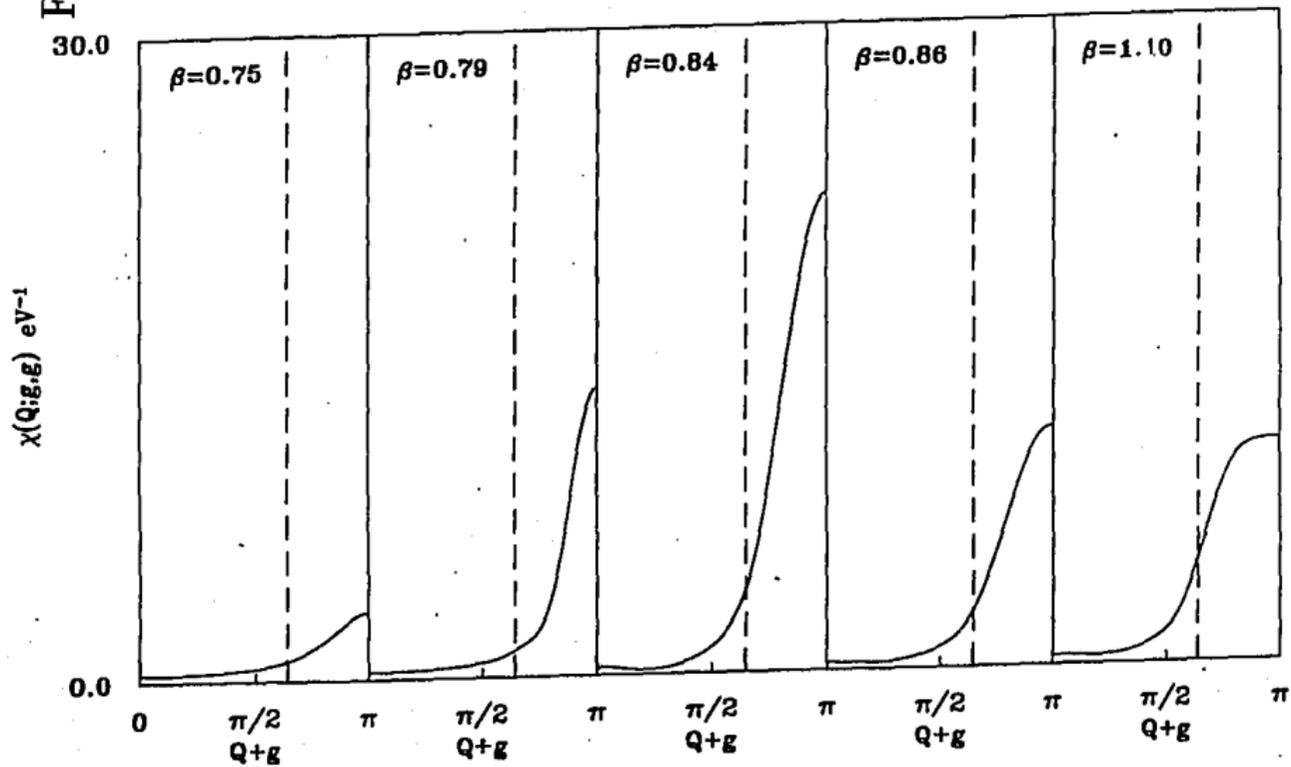
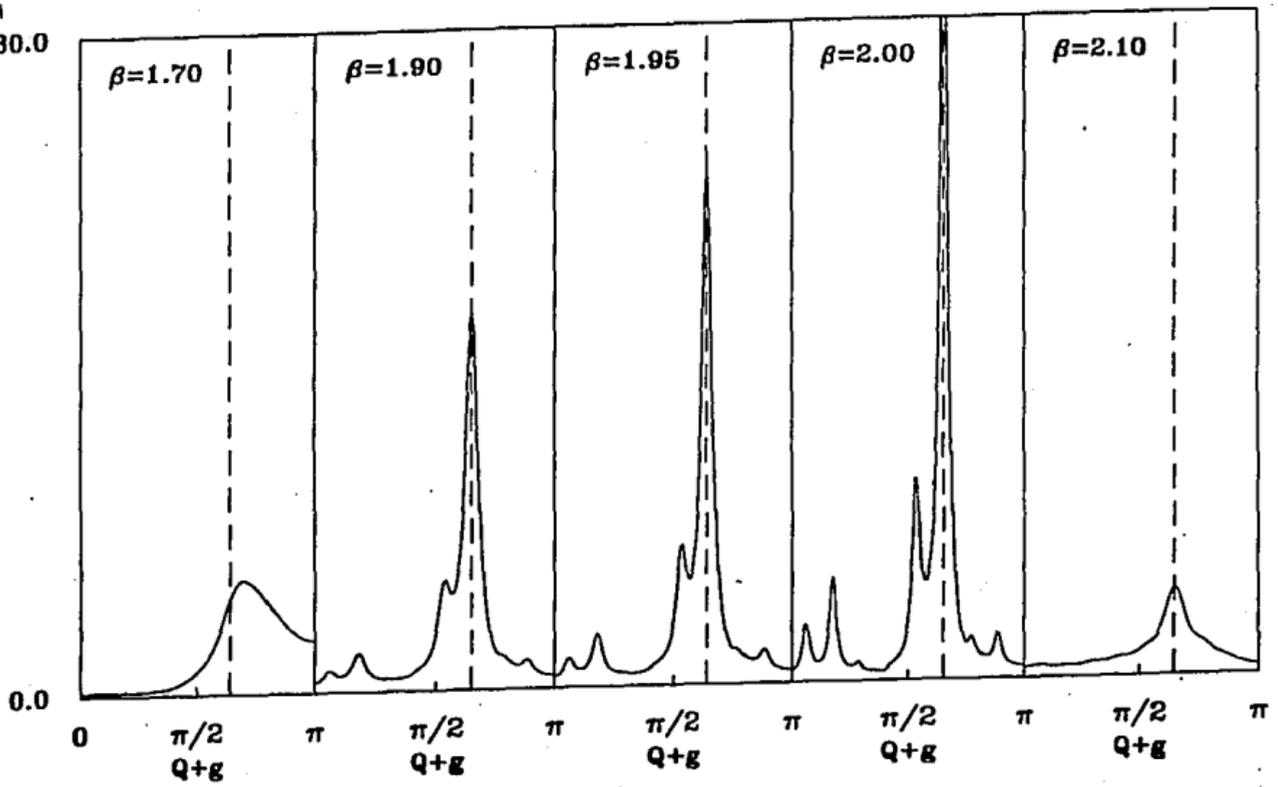


Fig. 11
 $\chi(Q;g) \text{ eV}^{-1}$

30.0



0.0

Fig. 12

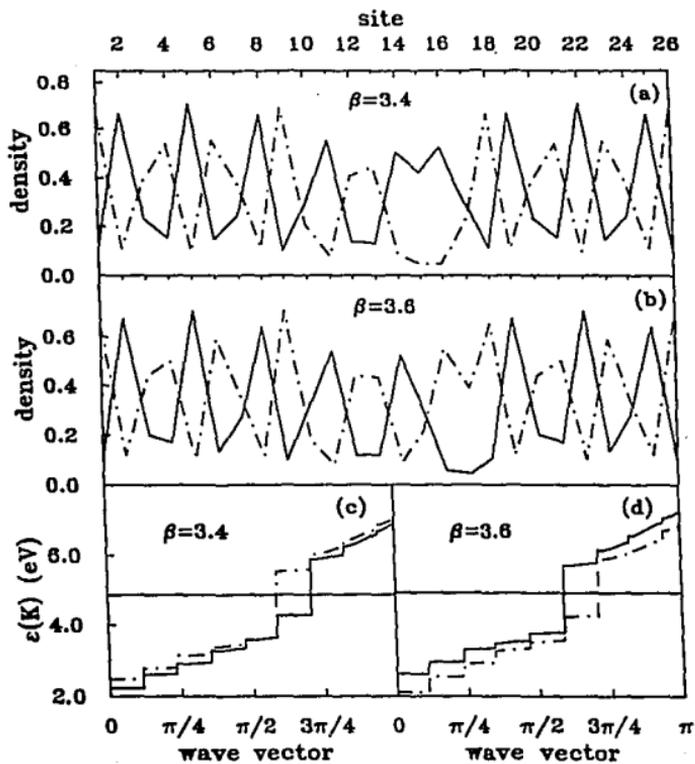


Fig. 13

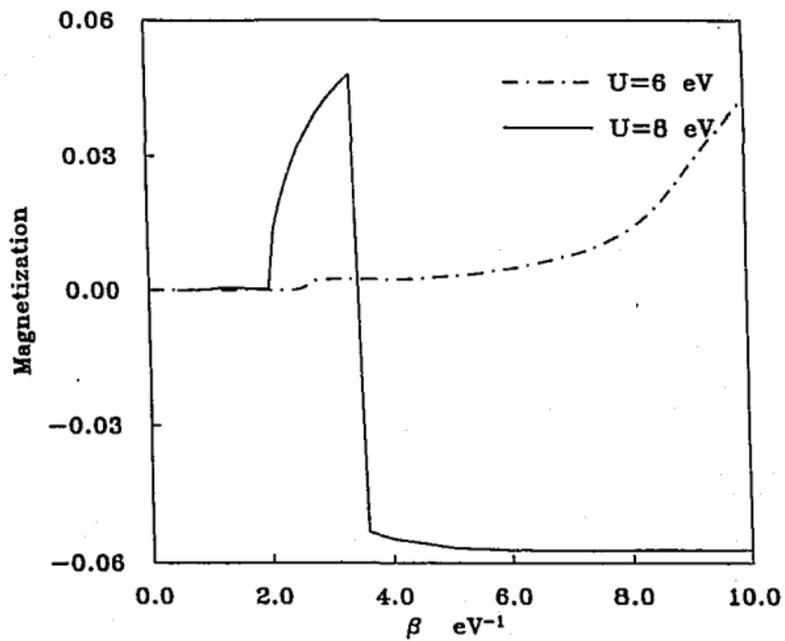


Fig. 14

$$U = 2 \text{ eV} \quad \langle \eta \rangle = 0.25$$

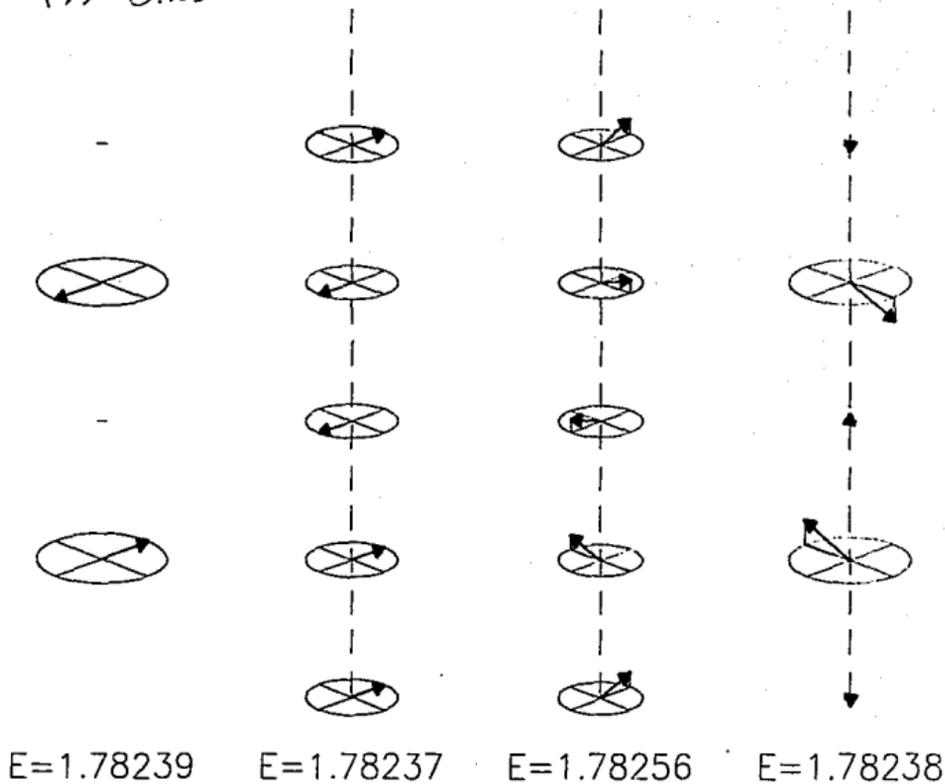


Fig. 15

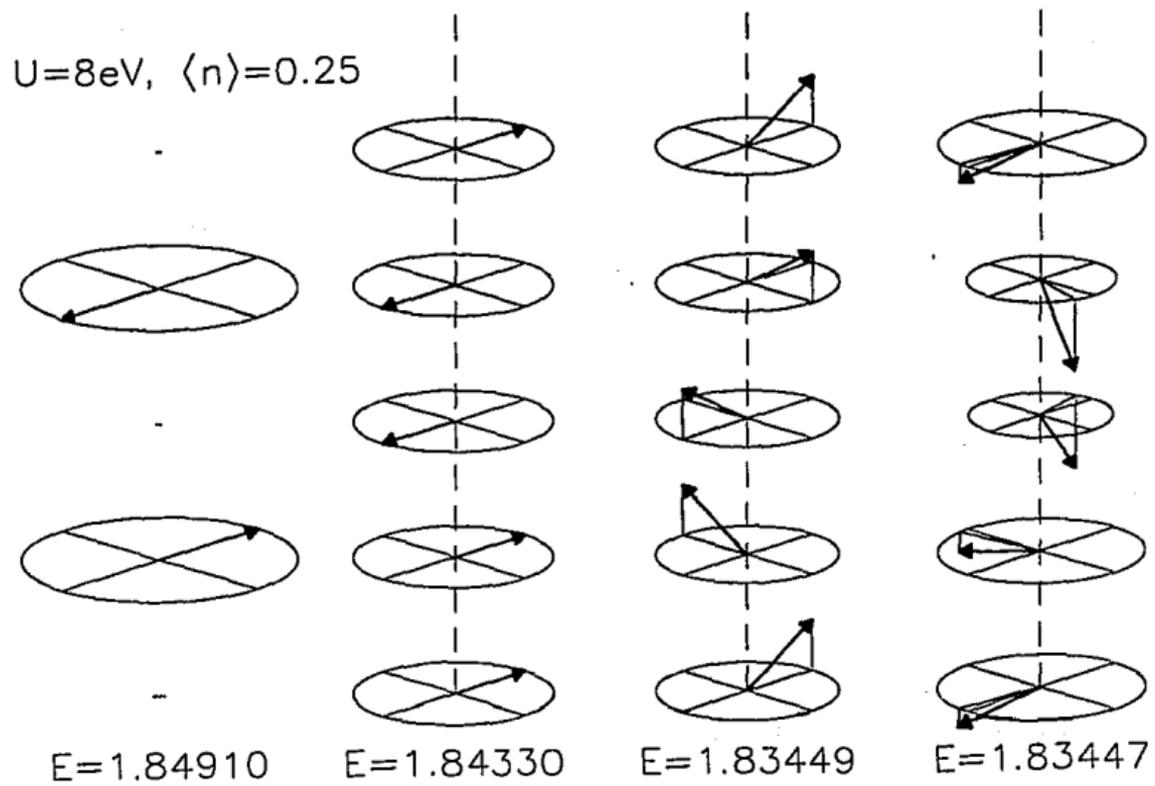
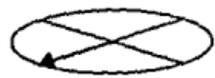
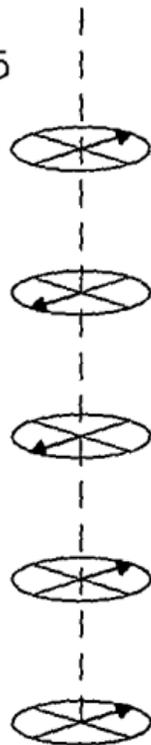


Fig. 16

$U=16\text{eV}$, $\langle n \rangle=0.25$



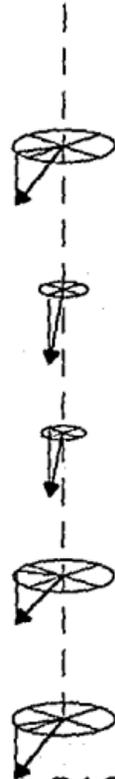
$E=1.88423$



$E=1.86458$



$E=1.81213$



$E=1.81212$

Fig. 17

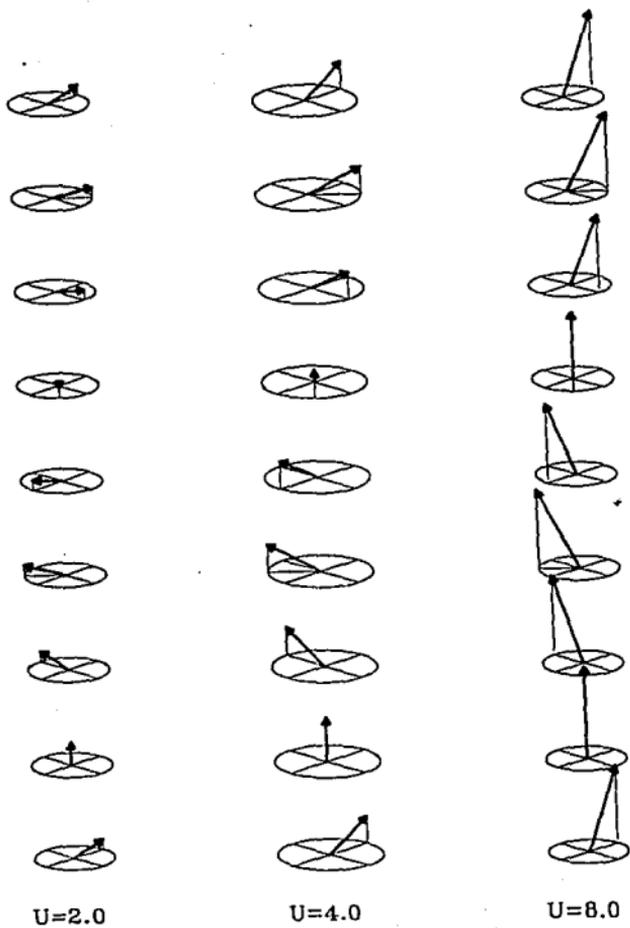


Fig. 18

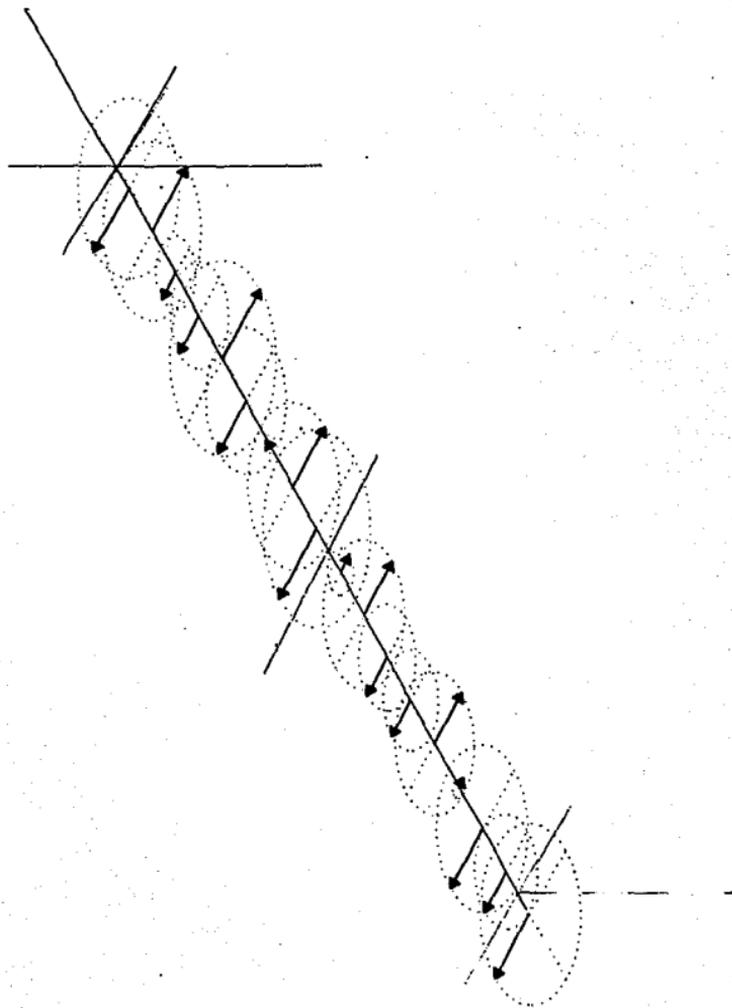
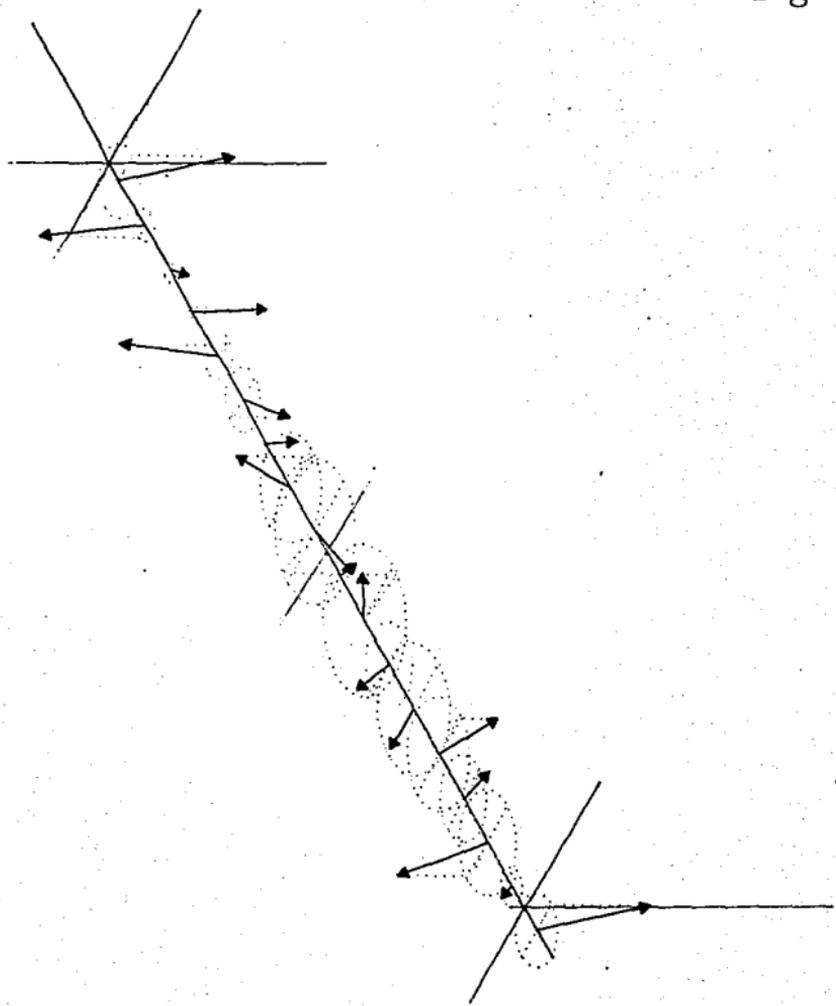


Fig. 19



TABLAS.

Tabla (1). Comparación entre el valor de las diferentes componentes (M_x, M_y, M_z) y magnitud del momento magnético total (M_{tot}), así como de la densidad total por sitio (N_{tot}), para las dos soluciones autoconsistentes ilustradas en las Figs. (18) y (19). Al pie de la tabla damos los valores de los parámetros del cálculo.

COMPARACION ENTRE LAS SOLUCIONES AUTOCONSISTENTES
CORRESPONDIENTES A LAS FIGURAS 18 Y 19

Sitio	Mx	My	Mz	Mtot	Ntot
1	.0000	.0000	-.5897	.5897	.7894
1	.5757	-.0799	.1000	.5897	.7871
2	.0000	.0000	.5572	.5572	.7764
2	-.5240	.1782	-.0323	.5544	.7728
3	.0000	.0000	-.1322	.1322	.6173
3	.0821	-.1302	-.0424	.1597	.6167
4	.0000	.0000	-.4100	.4100	.7001
4	.3752	-.1800	.0019	.4162	.7005
5	.0000	.0000	.6204	.6204	.8113
5	-.4694	.3896	.0876	.6162	.8074
6	.0000	.0000	-.3888	.3888	.6911
6	.2092	-.3097	-.1041	.3879	.6883
7	.0000	.0000	-.1600	.1600	.6223
7	.1648	-.0955	-.0048	.1905	.6236
8	.0000	.0000	.5683	.5683	.7837
8	-.2542	.4746	.1839	.5689	.7824
9	.0000	.0000	-.5841	.5841	.7872
9	.1427	-.5160	-.2270	.5815	.7837
10	.0000	.0000	.0614	.0614	.4931
10	.0930	.0447	.0493	.1143	.4818
11	.0000	.0000	.4754	.4754	.6391
11	.0369	.4406	.2413	.5037	.6285
12	.0000	.0000	-.3063	.3063	.5557
12	-.1758	-.1476	-.1124	.2555	.5183
13	.0000	.0000	-.4562	.4562	.5089
13	-.1571	-.3194	-.1978	.4072	.5763
14	.0000	.0000	-.4530	.4530	.5048
14	.3212	.1599	.1631	.3941	.5699
15	.0000	.0000	-.3181	.3181	.5588
15	.1592	.1755	.1339	.2722	.5236
16	.0000	.0000	.4702	.4702	.6363
16	-.4702	-.0756	-.1452	.4979	.6254
17	.0000	.0000	.0755	.0755	.4945
17	-.0614	-.0888	-.0564	.1218	.4839
U	NtotA	NtotB	Ntot	Va-Vb	Energia
8	6.5787	4.3913	10.9700	1.0840	1.9679
8	6.5624	4.4076	10.9700	1.1590	1.9698

Referencias.

- [1] Andrew Zangwill. *Physics at Surfaces* Cambridge University Press, Cambridge 1988.
- [2] H.Ibach y D.L. Mills. *Electron Energy Loss Spectroscopy and Surface Vibrations* Academic Press, Ney York.
- [3] J.F. McIntyre, Surf. Sci. **37**, 658 (1973)
R. Kötz y D.M.Kolb Surf. Sci. **64**, 96 (1977)
D.W. Lynch. Surf. Sci. **103**, 289 (1981)
- [4] F.H.Habraken y G.A. Bootsma. Surf. Sci. **87**, 5 (1979)
L.J. Hanekamp et. al. Surf. Sci. **118**, 1 (1982)
- [5] H.Raether. *Excitations of plasmons and interband transitions by electrons.* "Springer tracts on modern Physics", Vol 88, Springer Verlag 1980.
- [6] P.J. Feibelman, Prog. Surf. Sci. **12**, 287 (1982).
F. Forstmann y R.R. Gerhardts, *Metal optics near the plasma frequency* Springer, Berlin, 1986.
W.L. Schaich and K. Kempa, Phys. Scr. **35**, 204 (1987)
A. Liebsch, Phys. Scr. **35**, 204 (1987)
A.G. Eguiluz, Phys. Scr. **36**, 651 (1987)
- [7] P.J. Feibelman. Phys. Rev. B **40**, 2752 (1989)
- [8] W.L. Schaich y W. Chen, Phys. Rev. B **39**, 10714 (1989)

- [9] H. Ishida y A. Liebsch, Phys. Rev. B **42**, 5505 (1990)
H. Ishida y A. Liebsch, Phys. Rev. B **45**, 6171 (1992)
D.E. Beck, Phys. Rev. B **43**, 12611 (1991)
J.T. Lee y W.L. Schaich, Phys. Rev. B **43**, 4629 (1991)
- [10] J. H. Weaver *et al* "Optical Properties of Metals II" Internal report, Desy F41 HasyLab
81/05, (1981)
- [11] Jesús Tarriba. Tesis de Licenciatura en Física. UNAM
J. Tarriba y W.L. Mochán. Para ser publicado.
- [12] R. Contini y J.M. Layet, Solid State Comm. **64**, 1179 (1987)
- [13] D.Suto et. al. Phys. Rev. Lett. **63**, 2590 (1989)
- [14] M.Rocca y U. Valbusa, Phys. Rev. Lett. **64**, 2398 (1990)
- [15] M.Rocca, M.Lazzarino, y U. Valbusa, Phys. Rev. Lett. **67**, 3197 (1991)
- [16] A. Tadjedinne et. al. Surf. Sci. **101**, 277 (1980)
- [17] W.L. Mochan, R. Barrera, R. Fuchs. Phys. Rev. B **27**, 771 (1983)
- [18] J. Tarriba y L. Mochan, Phys. Rev. B **46**, 12902 (1992)
- [19] J. D.E. Mc. Intyre y D.E. Aspnes, Surf. Sci. **24**, 417 (1971)
- [20] Y. Borenztein, A. Tadjedinne, W.L. Mochán, J.Tarriba y R.G. Barrera. Para ser publicado en Phys. Rev. Lett..

- [21] Luis Mochán. *Influencia de la superficie en las propiedades ópticas de sistemas cristalinos*. Tesis de Doctorado, UNAM, 1983.
- [22] P.J. Feibelman, Prog. Surf. Sci. **12**, 287 (1982)
P. Apell *et al.* Phys. Scr. **30**, 367 (1984).
- [23] W.L. Mochán y R.G. Barrera. Phys. Rev. Lett. **55**, 1192 (1985)
- [24] B.R.A. Nijboer y F.W. de Wette, Physica **23**, 309 (1957);
F. de Wette y G.E.Schacher, Phys. Rev. **137**, A78 (1965).
- [25] G. Fuster *et al.* Phys. Rev. B **42**, 7322 (1990).
- [26] R.Q. Hood y L.M. Falicov. Phys. Rev. B **44**, 9989 (1991)
- [27] *Thin Growth Techniques for Low-Dimensional structures*, edited by R.F.C. Farrow *et al.*, (Plenum, New York, 1987);
Sintetic Modulated Structures, edited by L.L.Chang *et al.* (Academic Press, New York, 1985); B.Y. Jin and J.B. Adv. Phys. **38**, 189 (1989).
- [28] M.N.Baibich *et al.* Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988);
S.S.P.Parkin, N.More, and K.P.Roche, Phys. Rev. Lett. **64**, 2304 (1990);
W.R.Bennet, W.Schwarzcher, and W.F.Egelhoff Jr. Phys. Rev. Lett. **65**, 3169 (1990);
A. Barthelemy *et al.* J. Appl. Phys. **67**, 5908 (1990);
D.H.Mosca *et al.* J. Magn. Magn. Matter. **94**, L1 (1991); S.S.P. Parkin, R.Bhadra,
and K.P.Roche, Phys. Rev. Lett. **66**, 2152 (1991).
J. Unguris, R.J.Celotta, and D.T.Pierce, Phys. Rev. Lett. **67**, 140 (1991).

- [29] K.Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957);
T. Kasuya, Prog. Theoret. Phys. (Kyoto) **16**, 45 (1956);
M.A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).
- [30] P.M.Levy *et al.* J. Appl. Phys. **67**, 5914 (1990);
H. Hasegawa, Phys. Rev. **B42**, 2368 (1990).
- [31] P.Bruno and C.Chappert. Phys. Rev. Lett. **67**, 1602 (1991).
- [32] A.J. Freeman, *Magnetic Properties of Rare Earth Metals*, edited by R.J. Elliot (Plenum, New York 1972);
B. Coqblin. *The Electronic Structure of Rare-Earth Metals and Alloys: The Magnetic Properties*.
- [33] B.R.Cooper, Phys. Rev. **169**, 281 (1968).
- [34] W.M. Lomer (1962), Proc. Phys. Soc. **80**, 589 (1962).
- [35] S.H.Liu, R.P.Gupta and S.K.Sinha. Phys. Rev. B **4**, 1100 (1971).
- [36] R.E. Camley, J.Kwo and C.L.Chien, Phys. Rev. Lett. **64**, 2703 (1990).
- [37] E.H. Lieb y D.C. Mattis. *Mathematical Physics in One Dimension*. Academic Press, 1966.
- [38] Kyoto Summer Institute. *Physics of Low-Dimensional Systems Research Institute for Fundamental Physics*. Kyoto University.

- [39] Devreese, Evrard y Van Doren *Highly Conducting One-Dimensional Solids* Plenum Press, New York 1979.
- [40] *Magnetic Properties of Low Dimensional Systems* Editores:L.M. Falicov y J.L.Morán Lopez. Springer Verlag 1986.
- [41] J.C. Slater. Phys. Rev. **82**, 539 (1951).
- [42] Ann. Phys., Lpz, **4**, 121 (1930).
- [43] G. Grüner *Charge Density Waves in Solids* en *Future Trends in Material Sciences*. p. 119 World Scientific (1988).
- [44] H. Frölich. Proc. Roy. Soc. A **223**, 296 (1954).
- [45] J. Bardeen, L.N. Cooper, y J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [46] M.B.Salamon *et al.* Phys. Rev. Lett. **56**, 259 (1986);
F. Tsui *et al.* Phys. Rev. B **43**, 13320 (1991)
- [47] C. Herring, *Magnetism* Vol 4, ed. G.Rado y H. Suhl. (Academic Press, New York, 1963).
- [48] N.N. Bogoliubov. Sov. Phys. JETP **34**, 41, (1958).
- [49] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963); **277**, 237 (1964); **281**, 401 (1964).
- [50] L.M. Roth, H.J. Zeiger and T.A.Kaplan. Phys. Rev. **149**, 519 (1966).
- [51] R. White. *Quantum Theory of Magnetism*. Springer Verlag.

- [52] Elliot H. Lieb and F.Y. Wu. Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968)
- [53] K. Levin, S. Cunningham and D.L.Mills. Phys. Rev. B **10**, 3821 (1974).
- [54] A.W. Overhauser. Phys. Rev. Lett. **4**, 462 (1960).
- [55] A.W.Overhauser. Phys. Rev. **128**, 1437 (1962).
- [56] P.A. Fedders and P.C. Martin. Phys. Rev. **143**, 245 (1966).
- [57] Kittel, *Quantum Theory of Solids* (J. Wiley and Sons, New York, 1963).
- [58] P. Lederer and D.L. Mills J. Appl. Phy. **39**, 706 (1968).
- [59] J. Cullen Phys. Rev. **184**, 518 (1969).
- [60] J. Tarriba Unger y D.L. Mills, Phys. Rev. B **47**, 11945 (1993).