

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO**

**FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA**

**UNIDAD DE INVESTIGACIÓN**



**“APLICACIÓN DEL MÉTODO DE FASE  
ESTACIONARIA EN SISTEMAS DE MULTICAPAS DE  
METALES DE TRANSICIÓN”**

**AUTOR: RICHARD SAÚL TORIBIO SAAVEDRA**

**(PERIODO DE EJECUCIÓN: Del 01 de junio de 2022 al  
31 de mayo de 2023)**

**(Resolución de aprobación N°463-2022-R)**

Callao, 2023



*DEDICATORIA*

*A mi familia.*

## AGRADECIMIENTO

Primero agradecer al Dr. José d'Albuquerque e Castro, por la asesoría en este trabajo de investigación.

Y, finalmente, al FEDU de la Universidad Nacional del Callao, por el apoyo financiero parcial a este proyecto de investigación.

# Índice general

|  |           |
|--|-----------|
| <b>I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA</b>                   | <b>9</b>  |
| 1.1. Descripción de la realidad problemática . . . . . | 9         |
| 1.2. Formulación del problema . . . . .                | 9         |
| 1.3. Objetivos . . . . .                               | 10        |
| 1.3.1. Objetivo general . . . . .                      | 10        |
| 1.3.2. Objetivo específicos . . . . .                  | 10        |
| 1.4. Limitantes de la investigación . . . . .          | 10        |
| <b>II. MARCO TEÓRICO</b>                               | <b>11</b> |
| 2.1. Antecedentes . . . . .                            | 11        |
| 2.1.1. Antecedente Internacional . . . . .             | 11        |
| 2.1.2. Antecedente Nacional . . . . .                  | 12        |
| 2.2. Marco: . . . . .                                  | 12        |
| 2.2.1. Teórico . . . . .                               | 12        |
| 2.2.2. Conceptual . . . . .                            | 22        |
| 2.3. Definición de términos básicos . . . . .          | 26        |
| <b>III. HIPÓTESIS Y VARIABLES</b>                      | <b>28</b> |
| 3.1. Hipótesis . . . . .                               | 28        |
| 3.2. Definición conceptual de variables . . . . .      | 28        |
| 3.3. Operacionalización de variables . . . . .         | 29        |
| <b>IV. DISEÑO METODOLÓGICO</b>                         | <b>30</b> |
| 4.1. Tipo y diseño de la investigación . . . . .       | 30        |
| 4.2. Método de investigación . . . . .                 | 30        |

|   |           |
|---|-----------|
| 4.3. Población y muestra . . . . .  | 30        |
| 4.4. Lugar del estudio y periodo desarrollado . . . . .                                       | 31        |
| 4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información . . . . .                  | 31        |
| 4.6. Análisis y procedimiento de datos . . . . .  | 31        |
| <b>V. RESULTADOS</b>  | <b>32</b> |
| 5.1. Resultados descriptivos . . . . .  | 32        |
| 5.2. Resultados inferenciales . . . . .   | 32        |
| 5.3. Otro tipo de resultados de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis . . . . . | 33        |
| <b>VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS</b>  | <b>34</b> |
| 6.1. Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados . . . . .                | 34        |
| 6.2. Contrastación de los resultados con otros estudios similares . . . . .                   | 34        |
| 6.3. Responsabilidad ética . . . . .  | 34        |
| <b>CONCLUSIONES</b> . . . . .   | <b>35</b> |
| <b>RECOMENDACIONES</b> . . . . .  | <b>36</b> |
| <b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> . . . . .   | <b>37</b> |
| <b>ANEXOS</b> . . . . .   | <b>39</b> |

## RESUMEN

El presente trabajo realiza la aplicación del método de fase estacionaria en problemas relacionados con las propiedades electrónicas de las superficies y multicapas de los metales de transición.

Nuestros resultados indican que la integral asintótica presentes en dichos sistemas, tienen solución aproximada que ha sido aplicado a sistemas de multicapas de los metales de transición. Finalmente, se concluye que la presencia de un punto estacionario y las oscilaciones rápidas de la función exponencial  $\exp(2il\alpha(\mathbf{k}^\circ, w))$  y del factor  $\exp(2iNak_z^\circ(\mu))$ , son importantes para determinar el periodo, el decaimiento asintótico y la dependencia de la temperatura de las oscilaciones en el acoplamiento de intercambio.

Palabras-claves: Método de fase estacionaria, multicapas y acoplamiento de intercambio.

## ***ABSTRACT***

The present work carries out the application of the stationary phase method in problems related to the electronic properties of the surfaces and multilayers of the transition metals.

Our results indicate that the asymptotic integral present in these systems has an approximate solution that has been applied to multilayer systems of transition metals. Finally, it is concluded that the presence of a stationary point and the rapid oscillations of the exponential function  $\exp(2i\ell\alpha(\mathbf{k}^\circ, w))$  and the factor  $\exp(2iNak_z^\circ(\mu))$ , are important to determine the period, the asymptotic decay and the dependence of the temperature of the oscillations in the exchange coupling.

Key-words: Method of stationary phase, multilayers and exchange coupling.



## INTRODUCCIÓN

El método de fase estacionaria presenta importantes problemas de aplicación que aparecen en diferentes líneas de investigación como en: óptica [1, 2], en mecánica cuántica [3, 4] y también en física del estado sólido[5, 6, 7]. Este último será de interés en nuestra investigación.

Los progresos obtenidos en la preparación de los sistemas metálicos de baja dimensionalidad, tales como las superficies, las películas delgadas y las multicapas han despertado gran interés, debido a que presentan propiedades bastante peculiares. Dichas propiedades están relacionadas al desarrollo de la técnicas de alto vacío. Los métodos más conocidos son el sputtering (pulverización catódica) [8] y la técnica de crecimiento epitaxial por haces moleculares (o MBE, por sus siglas en inglés)[9]. Desde entonces, no han parado de publicarse artículos en un campo que está en alza debido a la creciente mejora de técnicas de fabricación en alto vacío y ultra alto vacío. Es más, no solo se han producido avances que permiten un crecimiento más controlado de láminas delgadas y multicapas, también se han mejorado las técnicas de caracterización estructural y magnética.

En 1988, Baibich y colaboradores [10] presentaron mediciones de magnetorresistencia en multicapas metálicas de Fe/Cr con acople antiferromagnético. Dado que los valores de magnetorresistencia alcanzados en estos sistemas eran de casi 50%, aproximadamente un orden de magnitud mayor que los valores de MR conocidos hasta entonces, se denominó a este efecto magnetorresistencia gigante (GMR, por sus siglas en inglés). El descubrimiento de este fenómeno generó gran interés. Poco tiempo después aparecieron en el mercado los cabezales para lectores de discos rígidos basados en la GMR, lo cual significó un gran avance en la industria informática [11, 12, 13].

Se han medido también efectos importantes de magnetorresistencia en tricapas con espaciadores aislantes. En este caso, la naturaleza de la conducción eléctrica es muy diferente a la de las multicapas metálicas: los portadores atraviesan el espaciador por efecto túnel, y por ende este fenómeno es conocido como magnetorresistencia túnel (TMR, por sus siglas en inglés)[14].

Los sistemas formados por materiales ordenados, construidos a través de la depo-

sición de películas delgadas de dos o más metales, donde al menos uno es magnético exhiben nuevos efectos físicos y poseen un enorme potencial en términos de aplicaciones tecnológicas [8, 6]. Estos materiales artificiales son llamados multicapas magnéticas, y de hecho, son temas principales de investigación en la actualidad [12]. Una gran cantidad de nuevos fenómenos físicos fueron observados en aquellos sistemas. Estos fenómenos incluyen la magneto-óptica, magnetorresistencia gigante, acoplamiento de intercambio magnético y la anisotropía en las superficies magnéticas.

Basándonos en esa idea, analizamos el caso de integrales que han sido utilizadas en la física del estado sólido [4,5,6]. Como por ejemplo,

$$I = \int dw \int dq_x \int dq_y f(w) C(w, q_x, q_y) e^{iQ(w, q_x, q_y)N} \quad (1)$$

donde las variables  $w$ ,  $q_x$  y  $q_y$  representan la energía y las coordenadas en el espacio recíproco, respectivamente. A pesar de omitir los límites de integración, puntualizamos que mientras que,  $w$  recorre a lo largo de todo el eje real, los vectores de onda  $q_x$  y  $q_y$  están limitadas por la primera zona de Brillouin bidimensional (2D). Nótese que el integrando es una función periódica de  $N$ , mientras que ésta oscila con un vector de onda  $Q(w, q_x, q_y)$  y tiene su amplitud gobernada por  $C(w, q_x, q_y)$  y  $f(w)$  representa la función de Fermi.

En el campo de sistemas de baja dimensionalidad, en el cual se incluyen las superficies, interfaces y películas delgadas, el cálculo de la estructura electrónica y de las propiedades magnéticas desempeñan un papel importante en la posibilidad de la elaboración de nuevos sistemas con propiedades deseadas [13].

Las multicapas magnéticas exhiben una variedad de propiedades, debido al carácter de la baja dimensionalidad de estos sistemas. Las propiedades magnéticas de las capas de metales de transición crecidos en sustratos metálicos son de gran interés en la actualidad. Al fabricar una heteroestructura compuesta por un metal ferromagnético (FM) y un metal no magnético (NM), aparecen propiedades magnéticas y de transporte eléctrico. En multicapas de este tipo, se produce un acople magnético entre las capas ferromagnéticas a través del espaciador. Esto hace que una multicapa compuesta de un material FM y uno NM pueda comportarse como un sistema

antiferromagnético (AF)[12, 11].

Durante la década de 1980, se trabajó mucho en el estudio del acople magnético en multicapas metálicas compuestas por metales de transición FM (Fe, Co, Ni) y distintos tipos de metales no FM, ya sea metales de transición con orden AF (Mn, Cr), metales de transición NM (Ru, Ir, Mo, Pd) o metales nobles (Au, Ag, Cu)[15].

En la mayoría de los casos se determinó que el acople magnético oscila con el espesor del espaciador, y se encontró que puede existir una superposición de oscilaciones con distintos períodos. El origen del acople reside en un intercambio indirecto tipo RKKY [16], que acopla los espines de iones magnéticos a través del espín de los electrones de conducción de la matriz no magnética.

El hecho de que el signo del acople magnético en multicapas varíe con el espesor del espaciador, permite fabricar sistemas con las capas FM acopladas de manera FM o AF sintonizando el espesor del espaciador.

Calculamos la densidad de estados para una red infinita bidimensional (2D), en segundo lugar, determinamos la variación de energía electrónica total en presencia de impurezas en un metal huésped infinito. Los cálculos de la variación en la densidad de estados y la energía total pueden ser desarrollados empleando el método de las funciones de Green [1,2,3]. Posteriormente, presentamos la aproximación de fase estacionaria que será el núcleo de la investigación [1,2]. Finalmente, presentamos la conclusión respecto al avance.

Las propiedades interesantes de sistemas magnéticos de baja dimensionalidad han atraído mucha atención en la comunidad científica. Las multicapas magnéticas metálicas, son un ejemplo de sistemas de baja dimensionalidad, están compuestas de capas ultrafinas alternadas de materiales magnéticos con diferentes propiedades magnéticas. Quizás lo más interesante de estos sistemas son los sándwiches y superredes con capas magnéticas separadas por espaciadores de capas no magnéticas. Debido a ello, las capas pueden tener diferentes espesores, un número infinito de combinaciones entre distintos metales es posible. Gracias al desarrollo de crecimientos y técnicas de análisis de películas delgadas, los sistemas pueden ser construidos con control detallado sobre la estructura y composición de los materiales a escala atómica. Frecuentemente los sistemas están hechos de unos pocos angstrom de

espesor [1].

Las dos propiedades más interesantes observadas en las multicapas metálicas magnéticas se encuentran la magnetorresistencia gigante (GMR, por sus siglas en inglés) y en el acoplamiento oscilatorio entre capas [2,3].

El acoplamiento antiferromagnético entre las capas de hierro en sándwiches Fe/Cr/Fe y superredes se ha observado mediante varias técnicas experimentales [4,5]. Parkin, More y Roche [6] reportaron oscilaciones en el acoplamiento de intercambio y en la magnetorresistencia como una función del espesor de la capa espaciadora no magnética en superredes Co/Ru, Co/Cr y Fe/Cr.

Posteriormente, presentamos la aproximación de fase estacionaria que será el núcleo de la investigación [15, 16]. Finalmente, presentamos la discusión de los resultados y conclusiones.

# I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

## 1.1. Descripción de la realidad problemática

En los últimos años existe una creciente atención en el estudio de las multicapas magnéticas. Las multicapas magnéticas son estructuras artificiales formadas por láminas que contienen distintos elementos magnéticos. Se hace necesario destacar que el estudio de materiales magnéticos basados en multicapas simétricas y asimétricas resulta un paso previo y básico para el desarrollo de grabado magnético de alta densidad [12].

En el presente trabajo se pretende llevar a cabo principalmente el cálculo de las integrales mostradas en las ecuaciones (1) y (1.2). Abordaremos el estudio de las integrales asintóticas aplicadas a problemas relacionados a estudios de la variación de la energía electrónica y a la importancia de las multicapas magnéticas.

## 1.2. Formulación del problema

Considerando las propiedades electrónicas de superficies y las multicapas de metales de transición podemos encontrarnos con la siguiente integral:

$$\sum_{k_{\parallel}} C(k_{\parallel}, w) e^{2i\alpha(k_{\parallel}, w)\ell} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{ZB} C(k_{\parallel}, w) e^{2i\alpha(k_{\parallel}, w)\ell} dk_{\parallel} \quad (1.2)$$

Entonces se puede plantear las siguientes preguntas:

¿Es posible que el método de fase estacionaria permita calcular la integral en el

espacio recíproco ?

¿Es posible usar el método de fase estacionaria para resolver la integral asintótica de la variación de la energía electrónica total?

## **1.3. Objetivos**

### **1.3.1. Objetivo general**

Calcular el comportamiento en la región asintótica de la variación de la energía electrónica total haciendo uso del método de fase estacionaria.

### **1.3.2. Objetivo específicos**

Identificar el comportamiento oscilatorio de la variación de la energía electrónica total de impurezas en aleaciones de metales de transición.

## **1.4. Limitantes de la investigación**

La limitante teórica se basa en la dificultad de conseguir material bibliográfico que trate el tema del método de fase estacionaria abordado en el estudio de sistemas de multicapas. La información teórica fue adquirida a través de trabajos de investigación en el extranjero usando las herramientas online.

Con respecto a la limitante temporal, estimamos que el tiempo requerido para poder concluir el presente proyecto de investigación será de aproximadamente doce meses.

La limitante espacial de la investigación se circunscribe en el ámbito de las propiedades electrónicas de superficies y multicapas de metales de transición. Calcularemos la variación de la energía electrónica total de un sistema semi-infinito debido a la presencia de una impureza sustitucional en un determinado plano  $\ell$  del sistema a partir de la superficie ( $\ell$ ). Consideraremos el modelo de ligaciones fuertes y las integrales de transferencia apenas entre primeros vecinos, considerando solamente un orbital por sitio[6].

# II. MARCO TEÓRICO

## 2.1. Antecedentes

### 2.1.1. Antecedente Internacional

**J.d'Albuquerque e Castro, M.S.Ferreira, and R.B.Muniz; Theory of the exchange coupling in magnetic metallic multilayers.1994**

El propósito de su estudio fue explicar la teoría del acoplamiento de intercambio en multicapas metálicas magnéticas, en el cual presentan una formulación general del acoplamiento entre capas. Asumen que la capa magnética tiene la orientación (010)[16].

La diferencia con el presente trabajo, es que consideramos el modelo de una banda-s en una red cúbica simple con orientación cristalográfica (001), tomando en cuenta las integrales de transferencia  $V$  apenas entre los primeros vecinos. La integral que desarrollaremos es diferente a lo dado por la ecuación (1).

**J Mathon, Murielle Villeret and D M Edwards., Exchange coupling in magnetic multilayer: effect of partial confinement of carriers. 1992**

El propósito de este trabajo, es estudiar el acoplamiento de intercambio  $J(\ell)$  entre capas magnéticas a lo largo de un espaciador no magnético; donde se ha observado un comportamiento oscilatorio que depende del espesor del espaciador  $\ell$ . Expansiones asintóticas para  $J(\ell)$  válida a temperatura finita y para una banda tight-binding simples son obtenidos[15].

La diferencia con el presente trabajo es que vamos a calcular la variación de

la energía electrónica total que es muy diferente a lo visto por los investigadores, pero la integral que resuelve en el mencionado artículo tiene similitud con el nuestro debido a que también ellos aplican el método de fase estacionaria.

### 2.1.2. Antecedente Nacional

Con respecto al estudio del cálculo de la integral mediante el método de fase estacionaria en el estudio de multicapas magnéticas, no se han encontrado trabajos similares en nuestro medio.

## 2.2. Marco:

### 2.2.1. Teórico

#### Aproximación de enlace fuerte

La aproximación de enlace fuerte consiste en describir los estados electrónicos de un sólido a partir de las funciones y de las energías atómicas [17, 18, 19].

El Hamiltoniano de enlaces fuertes que utilizamos para describir una de las subbandas, expresada en la notación de Dirac, tiene la forma siguiente:

$$H = \sum_l |l\rangle \epsilon_l \langle l| + \sum_{l \neq m} |l\rangle t_{lm} \langle m| \quad (2.3)$$

Donde  $\epsilon_l$  es la energía del orbital atómico, corregido por un término de campo cristalino centrado en el sitio  $l$ , como es mostrado en la figura 2.1. Cada estado  $|l\rangle$  es un orbital de tipo atómico centrado en el sitio  $l$  y  $t_{lm}$  es denominado elemento de matriz de transferencia, el cual permite a la partícula "saltar" de un sitio  $l$  a otro  $m$ .

Los elementos de matriz del hamiltoniano, dentro de este subespacio, estarán dados al aplicar el bra y ket a la ecuación (2.3), por

$$\langle l|H|m\rangle = \sum_l \langle l|l\rangle \epsilon_l \langle l|m\rangle + \sum_{l \neq m} \langle l|l\rangle t_{lm} \langle m|m\rangle \quad (2.4)$$

$$= \epsilon_l \delta_{lm} + t_{lm} \quad (2.5)$$



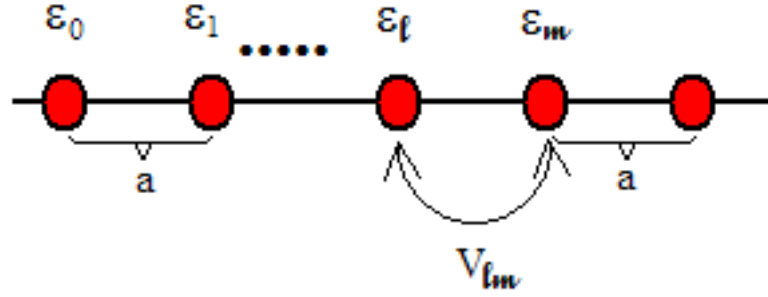


Figura 2.1: Diagrama de una cadena lineal infinita mostrando la energía electrónica sobre cada sitio ( $l$  ó  $m$ ) y un elemento de matriz de transferencia ( $V_{lm} = t_{lm}$ ).

Donde  $\langle l|m \rangle = \delta_{lm}$ , siguiendo la notación usual hemos denotado los elementos diagonales de la matriz por  $\epsilon_l$  y los elementos fuera de la diagonal de la matriz por  $t_{lm}$ .

Representando la ecuación (2.3) en el espacio de momentos, tendremos:

$$\hat{H} = \epsilon_0 + \sum_{l,m} |l\rangle t_{lm} \langle m| \quad (2.6)$$

$$\hat{H}|k\rangle = \epsilon_0|k\rangle + \sum_{l,m} |l\rangle t_{lm} \langle m|k\rangle \quad (2.7)$$

donde los autovectores  $|k\rangle$  de  $\hat{H}$  pueden ser obtenidos por la transformación:

$$|k\rangle = c_0 \sum_{l'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} |l'\rangle \quad (2.8)$$

Reemplazándolo en la expresión de la derecha obtenemos:

$$\begin{aligned} \hat{H}|k\rangle &= \epsilon_0|k\rangle + \sum_{l,m} |l\rangle t_{lm} \langle m|c_0 \sum_{l'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} |l'\rangle \\ &= \epsilon_0|k\rangle + \sum_{l,m} |l\rangle t_{lm} c_0 \sum_{l'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} \langle m|l'\rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

Finalmente, la expresión de la derecha representa, una delta de Dirac asociada a los subespacios  $m$  y  $l'$ , donde

$$\sum_{l'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} \langle m|l'\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'}$$

Además, utilizando  $t_{lm} = t$  y que debido a las dos sumatorias restantes es necesario partir la exponencial en los dos distintos subíndices:

$$\hat{H}/k > = \epsilon_0/k > + t c_0 \sum_{l'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} \sum_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} / l >$$

Volviendo a utilizar la ecuación (2.8):

$$\begin{aligned} \hat{H}/k > &= \epsilon_0/k > + t \sum_{l'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} / k > \\ E(k)/k > &= \epsilon_0/k > + t \sum_{l'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} / k > \end{aligned}$$

Las autoenergías  $E(k)$  son dadas por:

$$E(k) = \epsilon_0 + t \sum_{l'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{l}'} \quad (2.10)$$

Es interesante observar estructuras de bandas de sistemas con diferentes dimensionalidades. En el caso de una cadena lineal (1-D) tenemos:

$$E(k) = \epsilon_0 + t \left\{ e^{ikl} + e^{-ikl} \right\}$$

Tomando en cuenta los primeros vecinos de un átomo a su derecha e izquierda (ver figura 2.1), con lo cual podemos reemplazar el valor de  $l = a$  obtenemos:

$$E(k) = \epsilon_0 + 2t \cos(ka) \quad (2.11)$$

En sistemas bidimensionales (2-D):

$$E(k) = \epsilon_0 + 2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \quad (2.12)$$

Y para una red cúbica simple (3-D):

$$E(k) = \epsilon_0 + 2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)] \quad (2.13)$$

Donde  $a$  representa el parámetro de red.

En los tres casos podemos mostrar, a partir de las ecuaciones (2.11), (2.12) y (2.13), que las bandas se extienden desde  $\epsilon_0 - Z|t|$  hasta  $\epsilon_0 + Z|t|$ , donde  $Z$  es el número de primeros vecinos. Por lo tanto, podemos definir la semi-largura de la banda como  $W = Z|t|$ .

## Funciones de Green

Las funciones de Green pueden ser definidas como siendo la solución de la ecuación diferencial no homogénea de la forma:

$$[z - L(\vec{r})]G(\vec{r}, \vec{r}'; z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.14)$$

Además está sujeto a condiciones de frontera para  $\vec{r}$  y  $\vec{r}'$  que se encuentran sobre una superficie  $S$  y dominio  $\Omega$ . Aquí asumimos que  $z$  es un número complejo y  $L(\vec{r})$  es un operador diferencial hermitiano independiente del tiempo [19, 20] . Entonces:

$$z = \lambda \pm is \quad (2.15)$$

$$L(\vec{r})\phi_n(\vec{r}) = \lambda_n\phi_n(\vec{r}) \quad (2.16)$$

Trabajando con funciones de Green es conveniente el introducir un espacio vectorial abstracto, y la manera más conveniente de lograr esto es haciendo uso de la notación bra y ket de Dirac, escribimos:

$$\phi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} / \phi_n \rangle \quad (2.17)$$

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}')L(\vec{r}) = \langle \vec{r} / L / \vec{r}' \rangle \quad (2.18)$$

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; z) = \langle \vec{r} / G(z) / \vec{r}' \rangle \quad (2.19)$$

Demostrando la ecuación (15).

$$1 = (z - L)G(z) \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} / 1 / \vec{r}' \rangle &= \langle \vec{r} / (z - L)G(z) / \vec{r}' \rangle \\ \delta(\vec{r} - \vec{r}') &= \langle \vec{r} / zG(z) / \vec{r}' \rangle - \langle \vec{r} / LG(z) / \vec{r}' \rangle \\ &= zG(\vec{r}, \vec{r}'; z) - \int d\vec{r}'' \langle \vec{r} / L / \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' / G(z) / \vec{r}' \rangle \\ &= zG(\vec{r}, \vec{r}'; z) - \int d\vec{r}'' \delta(\vec{r} - \vec{r}'')L(\vec{r})G(\vec{r}'', \vec{r}'; z) \\ &= zG(\vec{r}, \vec{r}'; z) - L(\vec{r})G(\vec{r}, \vec{r}'; z) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Ahora, utilizando la ecuación (2.20), para todo  $z \neq L = \{\lambda_n\}$ :

$$G(z) = (z - L)^{-1} \quad (2.22)$$

Y debido a que cumple con la condición de completitud:

$$\sum_n \langle \phi_n \rangle \langle \phi_n / = 1 \quad (2.23)$$

Debido a las ecuaciones anteriores el operador  $G(z)$  puede ser escrito, utilizando la ecuación (2.16) para reemplazar el valor del operador  $L$ , de la siguiente manera:

$$G(z) = \sum_n \frac{\langle \phi_n | > \langle \phi_n |}{z - \lambda_n} \quad (2.24)$$

En la representación de coordenadas  $\vec{r}$  y  $\vec{r}'$ :

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; z) = \sum_n \frac{\langle \vec{r} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \vec{r}' \rangle}{z - \lambda_n} \quad (2.25)$$

- Como  $L$  es un operador hermitiano, entonces todos sus eigenestados  $\{\lambda_n\}$  son reales.
- Si  $Im\{z\} \neq 0$  y  $Real\{z\} \neq \{\lambda_n\}$ , entonces  $G(z)$  es una función analítica sobre el plano  $z$  complejo.

### **Función de Green perturbada**

La matriz de perturbación  $V$  que describe la interacción entre las impurezas y el metal huésped puro es definida como la diferencia entre los Hamiltonianos perturbado y no perturbado

$$V = H - H^0. \quad (2.26)$$

Las funciones de Green  $G^0(z)$  y  $G(z)$  correspondientes a  $H^0$  y  $H$  son respectivamente

$$G^0(z) = (z - H^0)^{-1} \quad (2.27)$$

$$G(z) = (z - H)^{-1} \quad (2.28)$$

Estas dos funciones pueden ser relacionadas, como mostramos a continuación. Como  $H = H^0 + V$ , expandiendo la ecuación (2.28) obtenemos

$$G(z) = G^0(z) + G^0(z) V G(z), \quad (2.29)$$

que corresponde a la ecuación de Dyson en una forma de operadores. A partir de esta ecuación, obtenemos la solución formal de la función de Green

$$G(z) = (1 - G^0(z) V)^{-1} G^0(z). \quad (2.30)$$

Expandiendo el operador  $(1 - G^0(z) V)^{-1}$  en serie de potencias, obtenemos:

$$G(z) = G^0(z) + G^0(z) V G^0(z) + G^0(z) V G^0(z) V G^0(z) + \dots, \quad (2.31)$$

que puede ser reescrita en la forma

$$\begin{aligned} G(z) &= G^0(z)(1 + V G^0(z) + V G^0(z) V G^0(z) + \dots) \\ &= G^0(z)(1 - V G^0(z))^{-1}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

o también

$$\begin{aligned} G(z) &= G^0(z) + G^0(z) (V + V G^0(z)V + V G^0(z) V G^0(z)V + \dots) G^0(z) \\ &= G^0(z) + G^0(z) T(z) G^0(z). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Aquí introducimos la matriz- $T$  ( indica todo el proceso que puede ocurrir en un sólido cristalino) , dada por

$$T(z) = V + V G^0(z)V + V G^0(z) V G^0(z)V + \dots. \quad (2.34)$$

Esta serie puede ser sumada, obteniendo

$$T(z) = V (1 - G^0(z) V)^{-1} \quad (2.35)$$

La matriz  $T$  es denominada matriz de esparcimiento y describe todos los procesos de esparcimiento envolviendo el potencial  $V$ .

Finalmente, podemos obtener los elementos de matriz  $\langle \ell | G(z) | m \rangle$  de la función de Green perturbada a partir de la expresión

$$\begin{aligned} \langle \ell | G(z) | m \rangle &= \langle \ell | G^0(z) | m \rangle + \langle \ell | G^0(z) T G^0(z) | m \rangle \\ G_{\ell,m}(z) &= G_{\ell,m}^0(z) + \langle \ell | G^0(z) T G^0(z) | m \rangle \\ &= G_{\ell,m}^0(z) + \sum_{p,q} \langle \ell | G^0(z) | p \rangle \langle p | T(z) | q \rangle \langle q | G^0(z) | m \rangle \\ &= G_{\ell,m}^0(z) + \sum_{p,q} G_{\ell,p}^0(z) T_{p,q}(z) G_{q,m}^0(z). \end{aligned} \quad (2.36)$$

En el caso de una única impureza, la ecuación (2.34) queda expresada como

$$T(z) = |0 \rangle \Delta \varepsilon \langle 0| + |0 \rangle \Delta \varepsilon \langle 0| G^0(z) |0 \rangle \Delta \varepsilon \langle 0| + \dots$$

definiendo el elemento de matriz

$$G_{00}^0(z) = \langle 0 | G^0(z) | 0 \rangle$$

se obtiene

$$T(z) = |0 \rangle \Delta\varepsilon (1 - G_{00}^0(z) \Delta\varepsilon)^{-1} \langle 0|$$

y la ecuación (2.33) resulta

$$G(z) = G^0(z) + G^0(z) |0 \rangle \Delta\varepsilon (1 - G_{00}^0(z))^{-1} \langle 0| G^0(z).$$

donde se ha considerado  $V = |0 \rangle \Delta\varepsilon \langle 0|$  y  $\Delta\varepsilon = (\varepsilon_B - \varepsilon_A)$  representa un potencial atractivo ( $\varepsilon_B < \varepsilon_A$ ) o repulsivo ( $\varepsilon_B > \varepsilon_A$ ).

### Variación en la densidad de estados

De la matriz de Green  $G(z)$ , es posible calcular propiedades del sistema perturbado [8,16]. La densidad de estados, por ejemplo, es dada por

$$\rho(E) = - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[G(E + i\eta)]. \quad (2.37)$$

Usando la Ec.(2.33) obtenemos

$$\begin{aligned} \rho(E) &= - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[G^0(z) + G^0(z) T(z) G^0(z)] \\ &= \rho^0(E) - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[G^0(z) T(z) G^0(z)], \end{aligned} \quad (2.38)$$

donde  $z = E + i\eta$ . La variación en la densidad de estados total producida por la impureza es entonces

$$\Delta\rho(E) = \rho(E) - \rho^0(E) = - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[G^0(z) T(z) G^0(z)] \quad (2.39)$$

Note que el trazo tiene propiedades cíclica, es decir  $\text{Tr}[ABC \cdots EF] = \text{Tr}[BC \cdots EFA]$ .

Asi,

$$\Delta\rho(E) = - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[T(z) (G^0(z))^2]. \quad (2.40)$$

Como

$$\frac{\partial}{\partial E} G^0(z) = -(G^0(z))^2, \quad (2.41)$$

tenemos que

$$\begin{aligned}
\Delta\rho(E) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[T(z) \frac{\partial}{\partial E}(G^0(z))] \\
&= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[(1 - G^0(z) V)^{-1} V \frac{\partial}{\partial E}(G^0(z))] \\
&= - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[\frac{\partial}{\partial E} \ln(1 - G^0(z) V)] \\
&= - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\partial}{\partial E} (\text{Tr} \ln(1 - G^0(z) V)). \tag{2.42}
\end{aligned}$$

Usando la relación  $\text{Tr} \ln[B] = \ln \det[B]$ , obtenemos

$$\Delta\rho(E) = - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\partial}{\partial E} (\ln \det[1 - G^0(z) V]). \tag{2.43}$$

## Variación de la energía electrónica total

La energía electrónica total del sistema es dada por la expresión :

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \rho(\omega) f(\omega). \tag{2.44}$$

donde  $f(\omega)$  es la función de Fermi-Dirac, que determina la ocupación de los estados disponibles y  $\rho(\omega)$  es la densidad de estados total. Para  $T = 0K$ , todos los estados están ocupados hasta el nivel de Fermi,  $E_F$ , es decir,  $f(\omega < E_F) = 1$  y  $f(\omega > E_F) = 0$ . Por lo tanto, la energía electrónica total de una matriz puro es dada por

$$E^0 = \int_{-\infty}^{E_F} \omega \rho^0(\omega) d\omega. \tag{2.45}$$

siendo  $\rho^0(\omega)$  la densidad de estados total del sistema no perturbado y del sistema perturbado por

$$E = \int_{-\infty}^{E_F} \omega, \rho(\omega) d\omega, \tag{2.46}$$

Estimamos la variación de la energía electrónica total  $\Delta E = E - E^0$  haciendo uso de las relaciones expresadas arriba:

$$\begin{aligned}
\Delta E &= \int_{-\infty}^{E_F} \omega (\rho(\omega) - \rho^0(\omega)) d\omega \\
&= \int_{-\infty}^{E_F} \omega \Delta\rho(\omega) d\omega. \tag{2.47}
\end{aligned}$$

donde  $\Delta\rho(\omega)$  es dado por la ecuación (2.39), que sustituyendo en la ecuación (2.47) resulta

$$\Delta E = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{E_F} \omega \text{Tr}[G^0(\omega) T G^0(\omega)] d\omega. \quad (2.48)$$

Haciendo uso de la propiedad cíclica del trazo del producto de matrices y de la ecuación (2.41), la ecuación (2.48) quedará como

$$\Delta E = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \int_{-\infty}^{E_F} \omega \frac{d}{d\omega} \ln(1 - G^0(\omega) V) d\omega \quad (2.49)$$

La diferencia entre la variación de la energía electrónica total cuando la impureza ocupa un plano arbitrario  $\ell$ , y aquella cuando la impureza está localizada en el volumen es:

$$\begin{aligned} \delta E_\ell &= \Delta E_\ell - \Delta E_{vol} \\ &= \frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \int_{-\infty}^{E_F} \omega \frac{d}{d\omega} \ln(I - \Delta\varepsilon_\ell G_{\ell\ell}^0), d\omega \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \int_{-\infty}^{E_F} \omega \frac{d}{d\omega} \ln(I - \Delta\varepsilon_\ell G_{vol}^0) d\omega \end{aligned} \quad (2.50)$$

evaluando la ecuación anterior se obtiene

$$\delta E_\ell = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Im} \text{Tr} \ln \{ (I - \Delta\varepsilon_\ell G_{\ell\ell}^0(w)) \times (I - \Delta\varepsilon_{vol} G_{vol}^0(w))^{-1} \} d\omega \quad (2.51)$$

Considerando que las integrales de transferencia se da apenas entre los planos primeros vecinos, podemos obtener una relación entre  $G_{\ell\ell}$  del sistema perturbado y  $G_{vol}^0$ . Partiendo de la ecuación (2.36)

$$G_{\ell\ell}(w) = G_{vol}^0(w) + \sum_{\mathbf{k}} G_{\ell,0}^0(\mathbf{k}, w) T_{0,0}(\mathbf{k}, w) G_{0,\ell}^0(\mathbf{k}, w) \quad (2.52)$$

donde  $T_{00}$  es la matriz de esparcimiento referido al potencial de esparcimiento dada por la ecuación (2.35), reescribimos

$$T_{00}(\mathbf{k}, w) = \Delta\varepsilon [1 - G_{vol}^0(\mathbf{k}, w)\Delta\varepsilon]^{-1} \quad (2.53)$$

tal que  $\mathbf{k}$  es un vector de onda de la primera zona de Brillouin. Cuando  $\Delta\varepsilon \rightarrow \infty$ , el sistema queda dividido en dos medios semi-infinitos desconectados y  $T_{00}$  se reduce a

$$T_{00}(\mathbf{k}, w) = - [G_{vol}^0(\mathbf{k}, w)]^{-1} \quad (2.54)$$



La ec.(2.52) es dada por

$$G_{\ell\ell}(w) = G_{vol}^0(w) - \sum_{\mathbf{k}} G_{\ell,0}^0(\mathbf{k}, w) [G_{vol}^0(\mathbf{k}, w)]^{-1} G_{0,\ell}^0(\mathbf{k}, w) \quad (2.55)$$

Supongamos que para  $\mathbf{k}$  y  $w$  fijos, las componentes de la sumatoria de  $\mathbf{k}$  oscile como una función periódica de  $\ell$ . Considerando el modelo de un orbital por sitio, con integrales de transferencias entre planos primeros vecinos, según [16] se demuestra que

$$G_{0n} = G_{vol} e^{in\alpha} \quad (2.56)$$

donde

$$\cos \alpha = \frac{w - \varepsilon(\mathbf{k})}{2t} \quad (2.57)$$

Este comportamiento oscilatorio fue observado en el estudio del acoplamiento de intercambio en sistemas de multicapas metálicas [21] al considerar el modelo multi-orbital. La ecuación (2.55) queda expresada mediante

$$G_{\ell\ell}(w) = G_{vol}^0(w) - \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}, w) e^{i2\alpha(\mathbf{k},w)\ell} \quad (2.58)$$

Para  $\ell$  grande, el factor  $exp(2i\alpha\mathbf{k}, w)\ell$  oscila rapidamente y solamente las regiones en el plano  $k_x - k_y$  donde  $k_z(\varepsilon, k_x, k_y)$  es estacionaria con respecto a  $k_x$  y  $k_y$  contribuye a la integral zona de Brillouin (ZB). Podemos usar el método de fase estacionaria para aproximar la integral para valores grandes de  $\ell$ .

Resolviendo la siguiente integral

$$\sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}, w) e^{i2\alpha(\mathbf{k},w)\ell} = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{ZB} dk_x dk_y C(\mathbf{k}, w) e^{2i\alpha(\mathbf{k},w)\ell} \quad (2.59)$$

Expandimos  $\alpha(\mathbf{k}, w)$  en una serie de Taylor en torno de sus puntos estacionarios, hasta los términos de segundo orden, obteniendo

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{k}, w) \approx & \alpha(k_x^\circ, k_y^\circ, w) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \alpha(k_x^\circ, k_y^\circ, w)}{\partial k_x^2} \right)_{k_x^\circ, k_y^\circ} (k_x - k_x^\circ)^2 \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \alpha(k_x^\circ, k_y^\circ, w)}{\partial k_y^2} \right)_{k_x^\circ, k_y^\circ} (k_y - k_y^\circ)^2 \end{aligned} \quad (2.60)$$

donde  $\mathbf{k}^0 = (k_x^0, k_y^0)$  es un punto estacionario para un dado  $w$ . Reemplazando en la ecuación (2.59) resulta

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}, w) e^{i2\alpha(\mathbf{k}, w)\ell} &= \frac{1}{(2\pi)^2} C(\mathbf{k}^0, w) e^{2i\alpha(\mathbf{k}^0, w)\ell} \\
&\times \iint_{BZ} dk_x dk_y e^{i\ell \left( \frac{\partial^2 \alpha(k_x^0, k_y^0, w)}{\partial k_x^2} \right) (k_x - k_x^0)^2 + i\ell \left( \frac{\partial^2 \alpha(k_x^0, k_y^0, w)}{\partial k_y^2} \right) (k_y - k_y^0)^2}
\end{aligned} \tag{2.61}$$

resolviendo la integral en el plano complejo resulta

$$\sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}, w) e^{i2\alpha(\mathbf{k}, w)\ell} = C(\mathbf{k}^0, w) \frac{e^{2i\alpha(\mathbf{k}^0, w)\ell}}{\pi^2 \ell} \frac{\pi \sigma}{\left| \frac{\partial^2 \alpha(k_x^0, k_y^0, w)}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 \alpha(k_x^0, k_y^0, w)}{\partial k_y^2} \right|^{1/2}} \tag{2.62}$$

que al reemplazar en la ec. (2.58) se obtiene

$$G_{\ell\ell}(w) = G_{vol}^0(w) - C(\mathbf{k}^0, w) \frac{e^{2i\alpha(\mathbf{k}^0, w)\ell}}{8\pi^2 \ell} \frac{\pi \sigma}{\left| \frac{\partial^2 \alpha(k_x^0, k_y^0, w)}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 \alpha(k_x^0, k_y^0, w)}{\partial k_y^2} \right|^{1/2}} \tag{2.63}$$

se observa que la función  $G_{\ell\ell}(w)$  se aproxima a  $G_{vol}(w)$  cuando  $\ell \rightarrow \infty$ , y de hecho se da en forma oscilatoria.

considerando

$$\sigma = \begin{cases} i, & \text{si } \alpha_{k_x k_x} > 0, \alpha_{k_y k_y} > 0 \\ -i, & \text{si } \alpha_{k_x k_x} < 0, \alpha_{k_y k_y} < 0 \\ 1, & \text{si } \alpha_{k_x k_x} \text{ y } \alpha_{k_y k_y} \text{ tienen signos opuestos} \end{cases}$$

$\sigma$  ha sido determinado por los valores de  $\frac{\partial^2 \alpha(k_x^0, k_y^0, w)}{\partial k_x^2}$  y  $\frac{\partial^2 \alpha(k_x^0, k_y^0, w)}{\partial k_y^2}$ .

### 2.2.2. Conceptual

En 1928 F. Bloch modeló electrones fuertemente ligados a los átomos, cuyas funciones de onda solamente se superponían débilmente a sus vecinos. Esta aproximación de enlace fuerte (tight binding, (TB, por sus siglas en inglés)) fue formalizada por Gregory Wannier en 1937, quien demostró que las funciones de Bloch pueden ser siempre sumadas para obtener un conjunto completo de funciones de onda que

poseen una amplitud considerable únicamente en átomos individuales. Los modelos basados en estas funciones de onda localizadas, han sido el punto de inicio para las investigaciones de los electrones en los metales, a pesar de que no existe un sistema físico que se encuentre particularmente representado en forma precisa por ningún modelo de enlace fuerte simple [5,6].

El presente trabajo se ocupa principalmente de los sólidos compuestos por átomos cuyos electrones de valencia ocupan orbitales atómicos razonablemente localizados en los sitios respectivos. Estos estados forman una banda de conducción relativamente estrecha en el sólido, que se encuentra parcialmente ocupada. De esta manera, adoptamos el modelo de enlace fuerte para describir la estructura electrónica del sistema. Con respecto a dicho formalismo, empleamos las funciones de Green calculadas en la base de los orbitales atómicos, a partir de los cuales, podemos calcular todas las propiedades mono-electrónicas de interés [10,11].

En este proyecto de investigación tratamos de calcular el acoplamiento de intercambio mediante el método de fase estacionaria [22].

### **Método de fase estacionaria para determinar el acoplamiento de intercambio (J)**

El acoplamiento antiferromagnético entre las capas de hierro en sándwiches Fe/Cr/Fe y superredes se ha observado mediante varias técnicas experimentales [23]. Parkin, More y Roche [24] reportaron oscilaciones en el acoplamiento de intercambio y la magnetorresistencia con una función del espesor de la capa espaciadora no magnética en superredes Co/Ru, Co/Cr y Fe/Cr.

A temperaturas finitas el potencial termodinámico total es dado por

$$\Omega = -T \sum_{\mathbf{k}, r} \ln \left[ 1 + e^{\frac{\mu - E(\mathbf{k}, r)}{T}} \right] \quad (2.64)$$

donde  $\mu$  es el potencial químico,  $E(\mathbf{k}, r)$  es la energía,  $\mathbf{k}$  es el vector de onda paralelo al sándwich, y  $r = 1, 2, 3, \dots, N - 1$  significa los niveles de energía discretos de agujeros ( $K_B = 1$ ).

Para evaluar la suma discreta sobre  $r$  de la ec.(2.64), necesitamos conocer la dependencia explícita de  $E(\mathbf{k}, r)$  sobre el número cuántico discreto  $r$ . Aplicamos la

fórmula de suma de Poisson

$$\sum_{r=1}^{\infty} \Phi(r) = 2Re \sum_{s=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \Phi(\xi) e^{2\pi is\xi} d\xi \quad (2.65)$$

donde el número cuántico discreto  $r$  es reemplazado por una variable continua  $\xi$ .

Por lo tanto, hemos considerado

$$\sum_{\mathbf{k}} \sum_r \ln \left[ 1 + e^{\frac{\mu - E(\mathbf{k}, r)}{T}} \right] = 2 \sum_{\mathbf{k}} Re \sum_{s=1}^{\infty} \int_0^{\infty} d\xi \ln \left[ 1 + e^{\frac{\mu - E(k_x, k_y, \xi)}{T}} \right] e^{2\pi is\xi} \quad (2.66)$$

y

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \left[ \frac{\Omega}{(2\pi)^d} \right] \int d\mathbf{k}$$

donde  $d = 1, 2, 3$  representa la dimensión del sistema.

Siguiendo a Parkin *et al* [24], definimos una constante de acoplamiento de intercambio para una capa espaciadora que contiene  $N$  planos atómicos por

$$J(N) = \frac{\Delta\Omega(N)}{A}$$

donde  $A$  es el área de un plano atómico.

El acoplamiento de intercambio (canje)  $J$  se define por:

$$J = -2T \frac{1}{(2\pi)^2} Re \sum_{s=1}^{\infty} \iint_{ZB} dk_x dk_y \int_0^{N-1} d\xi \ln \left[ 1 + e^{\frac{\mu - E(k_x, k_y, \xi)}{T}} \right] e^{2\pi is\xi} \quad (2.67)$$

donde la integral con respecto a  $k_x, k_y$  es sobre la zona de Brillouin (ZB) bidimensional en el plano sándwich el cual es asumido a ser paralelo al plano x-y.

Modelando la capa espaciador por una banda de ligación fuerte cúbica simple,

$$\varepsilon(k_x, k_y, k_z) = - [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)] \quad (2.68)$$

donde la energía es medida en unidades de hopping  $2|t|$ . Para dicha banda y un sándwich paralelo al plano x-y, la cuantización de  $k_z$  es dada por

$$k_z = \frac{r\pi}{Na}, \quad r = 1, 2, 3, \dots, N-1, \quad (2.69)$$

donde  $a$  es la distancia entre planos vecinos.

Integrando por partes la integral de la ec.(2.67) resulta

$$\int_0^{N-1} d\xi \ln \left[ 1 + e^{\frac{\mu - E(k_x, k_y, \xi)}{T}} \right] e^{2\pi is\xi} = \frac{1}{T2\pi is} \int d\varepsilon \left[ 1 + e^{\frac{\mu - E(k_x, k_y, \xi)}{T}} \right]^{-1} e^{2isNak_z} \quad (2.70)$$

Para obtener (2.70) hemos utilizado el resultado de que la función de Fermi es aproximadamente cero para  $\varepsilon$  en la parte superior de la banda.

Asumiendo la cuantización (2.69)

$$J = -\frac{1}{(2\pi)^2} Re \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s\pi i} \int_0^{N-1} d\varepsilon \left[ 1 + e^{\frac{\varepsilon-\mu}{T}} \right]^{-1} \iint_{ZB} dk_x dk_y e^{2isNak_z} \quad (2.71)$$

con  $k_z \equiv k_z(\varepsilon, k_x, k_y)$ . Para  $N$  grande, el factor  $\exp(2isNak_z)$  oscila rapidamente y solamente las regiones en el plano  $k_x - k_y$  donde  $k_z(\varepsilon, k_x, k_y)$  es estacionaria con respecto a  $k_x$  y  $k_y$  contribuye a la integral zona de Brillouin. Podemos usar el método de fase estacionaria para aproximar la integral para valores grandes de  $N$ . Asumimos que  $(k_x^0(\varepsilon), k_y^0(\varepsilon))$  es un punto estacionario.

$$k_z = k_z^{\circ} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_x^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}} (k_x - k_x^{\circ})^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_y^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}} (k_y - k_y^{\circ})^2 \quad (2.72)$$

Cuando  $N \rightarrow \infty$ , la integral de la ecuación (2.71) queda

$$\iint_{ZB} dk_x dk_y e^{2isNak_z} = \iint_{ZB} dk_x dk_y e^{2isNa \left[ k_z^{\circ} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_x^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}} (k_x - k_x^{\circ})^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_y^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}} (k_y - k_y^{\circ})^2 \right]} \quad (2.73)$$

ordenando la integral

$$\iint_{ZB} dk_x dk_y e^{2isNak_z} = e^{isNak_z^{\circ}} \int dk_x e^{isNa \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_x^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}} (k_x - k_x^{\circ})^2} \int dk_y e^{isNa \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_y^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}} (k_y - k_y^{\circ})^2} \quad (2.74)$$

Evaluando en torno del punto estacionario  $k_x^0, k_y^0$  la integral queda reducida a

$$e^{2isNak_z^0(\varepsilon)} \frac{\pi e^{i\pi/2}}{sNa \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_x^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}}^{1/2} \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_y^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}}^{1/2}} \quad (2.75)$$

Al sustituir en la ecuación (2.71) resulta

$$J = -\frac{1}{(4\pi Na)} Re \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s^2 \pi i} \int_0^{N-1} d\varepsilon \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon-\mu}{T}}} \frac{e^{2isNak_z^0(\varepsilon)} e^{i\pi/2}}{sNa \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_x^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}}^{1/2} \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_y^2} \right)_{k_x^{\circ}, k_y^{\circ}}^{1/2}} \quad (2.76)$$

ordenando la ecuación queda como

$$J = -\frac{1}{(4\pi Na)} \text{Re} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{e^{i\pi/2}}{s^2 \pi i \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_x^2} \right)_{k_x^0, k_y^0}^{1/2} \left( \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_y^2} \right)_{k_x^0, k_y^0}^{1/2}} \int_0^{N-1} d\varepsilon \frac{e^{2isNa k_z^0(\varepsilon)}}{1 + e^{\frac{\varepsilon-\mu}{T}}} \quad (2.77)$$

Desarrollando la última integral respecto a  $\varepsilon = \mu$ , es decir

$$e^{2isNa k_z^0(\varepsilon)} \approx e^{2isNa \left[ k_z^0(\mu) + \frac{\partial k_z}{\partial \varepsilon}(\varepsilon - \mu) \right]}$$

que al reemplazar a la última integral se obtiene

$$\int_0^{N-1} d\varepsilon \frac{e^{2isNa k_z^0(\varepsilon)}}{1 + e^{\frac{\varepsilon-\mu}{T}}} = e^{2isNa k_z^0(\mu)} \int d\varepsilon \frac{e^{2isNa \frac{\partial k_z^0}{\partial \varepsilon}(\varepsilon - \mu)}}{1 + e^{\frac{\varepsilon-\mu}{T}}} \quad (2.78)$$

Considerando la integral

$$\text{V.P.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ax}}{e^x + 1} dx = \frac{\pi}{\sin a\pi}, \quad 0 < a < 1. \quad (2.79)$$

Resolviendo la integral (2.78) en el plano complejo, resulta la fórmula general asintótica para el acoplamiento de intercambio  $J$

$$J \approx \frac{1}{4\pi Na} \text{Re} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\sigma}{s^2} \left| \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 k_z}{\partial k_y^2} \right|^{-1/2} \frac{e^{2isNa k_z^0(\mu)}}{T^{-1} \sinh [2\pi s Na T \partial k_z / \partial \varepsilon]} \quad (2.80)$$

considerando

$$\sigma = \begin{cases} i, & \text{ambas segundas derivadas} > 0, \\ -i, & \text{ambas derivadas} < 0, \\ 1, & \text{una derivada} > 0, \text{ la otra} < 0. \end{cases}$$

## 2.3. Definición de términos básicos

- **Impureza magnética** es una impureza que contiene momento magnético hospedado en un metal. La impureza magnética puede interactuar con la conducción de electrones del metal, produciendo efectos físicos interesantes como el efecto Kondo y el comportamiento de fermiones pesados.
- **La aproximación de enlace fuerte** se aplica a sistemas periódicos o no periódicos y se supone que los estados electrónicos del sólido en una determinada banda de energía pueden ser descritos como combinaciones lineales de algunos orbitales atómicos centrados en los sitios  $\mathbf{R}$  de la red.

- **La densidad de estados** en un sistema físico caracteriza al número existente de estados por cada intervalo de energía.
- **La energía electrónica total** del sistema es dada por la expresión :

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \rho(\omega) f(\omega).$$

donde  $f(\omega)$  es la función de Fermi-Dirac, que determina la ocupación de los estados disponibles y  $\rho(\omega)$  es la densidad de estados total. Para  $T = 0K$ , todos los estados están ocupados hasta el nivel de Fermi,  $E_F$ , es decir,  $f(\omega < E_F) = 1$  y  $f(\omega > E_F) = 0$ .

El método de fase estacionaria, fue desarrollada por Lord Kelvin en el año de 1887 cuando realizaba el estudio de la hidrodinámica. El mencionado método prueba estimaciones útiles de las integrales de funciones oscilantes [1].

Considere una integral de la forma general:

$$I[k] = \int_{-\infty}^{+\infty} r(x) e^{ik\mu(x)} dx. \quad (2.81)$$

donde  $k$ , es un parámetro real,  $r(x)$  es una función real y  $e^{ik\mu(x)}$  oscila a una razón que depende sobre ambos:  $k$  y de la forma funcional de  $\mu(x)$ .

Nuestro objetivo es estudiar el comportamiento de esta expresión para valores grandes de  $k$ . La contribución importante de la integral provienen de los puntos donde  $\mu'(x) = 0$ , estos son llamados los puntos estacionarios de  $\mu(x)$ .

# III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

## 3.1. Hipótesis

### HIPÓTESIS GENERAL

- El comportamiento de la variación de la energía electrónica total de una impureza en diferentes planos del sistema, con el origen de las energías localizadas en el volumen, haciendo uso del método de fase estacionaria.

### HIPÓTESIS ESPECÍFICAS

- El método de fase estacionaria en multicapas magnéticas nos permite encontrar el comportamiento oscilatorio de la variación de la energía electrónica total, en el límite asintótico. Por último, calculamos la fórmula asintótica para el acoplamiento de intercambio (J).

## 3.2. Definición conceptual de variables

A continuación presentamos el cuadro de acuerdo a la variable involucrada en el cálculo de la variación de la energía electrónica total mediante el método de fase estacionaria.



### 3.3. Operacionalización de variables

| VARIABLE  | DIMENSIONES      | INDICADORES   |
|---|------------------|---|
| <p><b>Independiente</b></p> <p>Variación de la energía electrónica total del sistema.</p> | Sistema infinito | <p>Cálculos analíticos y numéricos para determinar el comportamiento asintótico de la variación de la energía electrónica.</p> <p>Aplicación a una red cúbica simple, la superficie de fermi es dada por <math>E(k_x, k_y, k_z) = E_F</math>.</p> |
| <p><b>Dependiente</b></p> <p>Variación de la densidad de estados del sistema.</p>         | Sistema infinito | <p>Cálculos analíticos y numéricos para determinar la variación de la densidad de estados.</p> <p>Comportamiento oscilatorio en función del índice del plano <math>\ell</math> dependiendo de la ubicación de la impureza.</p>                    |

# IV. DISEÑO METODOLÓGICO

## 4.1. Tipo y diseño de la investigación

El presente proyecto está enmarcado en el tipo de investigación aplicada, cuantitativa y transversal.

El diseño de la investigación a desarrollar es teórico y consiste en calcular la integral (1) que surgen en los estudios de sistemas de multicapas magnéticas.

## 4.2. Método de investigación

Primeramente, calculamos la variación de la energía electrónica total debido a la presencia de impurezas sustitucionales en la superficie y en plano sub-superficiales. En segundo lugar, calculamos el comportamiento asintótico del acoplamiento de intercambio ( $J$ ) presente en el estudio de las multicapas magnéticas. Por último, calculamos la integral en  $k_{\parallel}$  utilizando la aproximación de fase estacionaria.

## 4.3. Población y muestra

Debido a la naturaleza de esta investigación, no se identifica población y muestra estadística.

#### **4.4. Lugar del estudio y periodo desarrollado**

El proyecto se realizará en mi actual domicilio durante los meses de junio hasta mayo del 2023, debido al estado de emergencia COVID-19.

#### **4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información**

Se recaudará información para establecer los fundamentos teóricos de nuestra investigación, como son: la variación de la energía electrónica total, la aproximación de enlaces fuertes, la aproximación de fase estacionaria y por último, los cálculos se realizan en la primera zona de Brillouin.

#### **4.6. Análisis y procedimiento de datos**

La variación de la energía electrónica total de diferentes impurezas de metales de transición en la dirección próximas a la superficie, considerando la dirección de crecimiento (100) nos permite calcular el comportamiento asintótico (método de fase estacionaria) de la variación de la energía electrónica en función de la posición de la impureza relativa a la superficie. Para ello, utilizaremos la aproximación de enlaces fuertes, teniendo como herramienta matemática la técnica de las funciones de Green. Finalmente, calcularemos la fórmula asintótica del acoplamiento de intercambio de capas ferromagnéticas.

# V. RESULTADOS

Con el fin de estudiar las propiedades electrónicas de las superficies y multicapas de los metales de transición nos encontramos con integrales definida en la ecuación (1). Hemos aplicado el método de fase estacionaria, en primer lugar al comportamiento de la función de Green del sistema perturbado y en segundo lugar, para determinar la fórmula asintótica del acoplamiento de intercambio ( $J$ ), ambas evaluadas a distancias suficientemente grandes donde hemos determinado la integral sobre  $\mathbf{k}$ .

## 5.1. Resultados descriptivos

En este trabajo se ha investigado el cálculo de la integral (1) mediante el método de fase estacionaria aplicada al estudio de la variación de la energía electrónica total en presencia de impurezas. Por cuestiones didácticas se ha convenido considerar y/o trabajar con una red cúbica simple semi-infinita, con parámetro de red  $a$ . y la superficie está en la dirección (001).

## 5.2. Resultados inferenciales

Un resultado importante del estudio de las multicapas magnéticas, es el hecho de que el sistema responde de forma diferente al ordenamiento de una capa ferromagnética separada por una capa metálica no magnética. Este hecho nos llevó a investigar la integral (1) mediante el método de fase estacionaria. Donde la integral contenida en la ecuación (2) lo resolvemos en el plano complejo.

### **5.3. Otro tipo de resultados de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis**

Por ser de carácter teórico de la investigación, no se aplicarán técnicas estadísticas a los datos, por lo que no se realizará el análisis estadístico de los datos.

# VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

## 6.1. Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados

No es posible; por ser un trabajo analítico y computacional.

## 6.2. Contrastación de los resultados con otros estudios similares

Actualmente existen varios trabajos relacionados con la aplicación del método de fase estacionaria en sistemas de multicapas de metales de transición, usando diferentes métodos o técnicas matemáticas que permitan entender la física del problema. Todos estos trabajos, estudian los efectos del periodo de oscilaciones, el comportamiento asintótico a la temperatura  $T = 0$ .

En nuestro caso, hemos considerado el método de fase estacionaria, para calcular la fórmula asintótica del acoplamiento de intercambio  $J$ .

## 6.3. Responsabilidad ética

No se aplica tal responsabilidad, por tratarse de un resultado analítico en un contexto matemático.

## CONCLUSIONES

- Para abordar el problema de la variación de la energía electrónica total y del acoplamiento de intercambio, abordamos bases teóricas y herramientas matemáticas que nos permitan entender y comprender los fenómenos físicos que ocurrirán al abordar mediante el método de fase estacionaria.

Primero aplicamos al estudio de la variación de la energía electrónica total mediante la herramienta matemática de las funciones de Green. En segundo lugar, al estudio del acoplamiento de intercambio  $J$  mediante el método de fase estacionaria. Esta será relevante cuando lo apliquemos a la red cúbica simples.

- En el estudio de ambos cálculos, observamos el comportamiento oscilatorio de la función exponencial  $\exp(2il\alpha(\mathbf{k}, w))$ .

## RECOMENDACIONES

- Como trabajo futuro tenemos que comparar nuestros resultados con los resultados obtenidos numericamente.
- Considerar un sistema descrito por el modelo de ligaciones fuertes con un orbital por sitio, de una red cúbica simples.



## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Ávila G. **O Método da Fase Estacionaria** *Matemática Universitaria*, N°9/10, pag. 131. 1989.
2. Goldstein H. **Classical Mechanics**, *Addison Wesley* 1972.
3. Maslov V. y Fedoryuk M. **Semi-Classical Approximations in Quantum Mechanics**, *Dordrecht: Reidel* 1981.
4. Schiff L. **Quantum Mechanics**. 2.ed. McGraw-Hill, New York, 1955. p.105
5. De Castro Barbosa A.C. y D'Albuquerque e Castro J. **Electronic structure of substitutional impurities near metallic surfaces**. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* Vol.121, pág. 167. 1993.
6. A.C. de Castro Barbosa, **Estrutura Eletrônica de Impurezas em Sistemas de Multicamadas Metálicas**, *Tese de Mestrado*, 1992.
7. Ferreira M.S., 1997 **Tese de PhD.**, Imperial College, Londres.
8. Stuart R.V. **Vacuum Technology, Thin Films, and Sputtering An Introduction**, Academic Press, 2012.
9. Farrow Robin F.C. **Molecular Beam Epitaxy: applications to Key Materials**. Noyes Publications, New Jersey, EE.UU. 1995.
10. M.N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Ffreiderch, y J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, pág. 2472. 1988.
11. Wolf E.L., **Nanophysics and Nanotechnology** Second, Update and Enlarged Edition, WILEY-VCH. 2006.
12. Estébanez I., **Multicapas magnéticas** Grado: Doble grado física-matemáticas(Opción B), Facultad de Ciencias, Universidad de Oviedo, España. 2017.
13. Candid Reig, Susana Cardoso de Freitas, Subhas Chandra Mukhopadhyay. **Giant Magnetoresistance (GMR) Sensors**, Springer Berlin, Heidelberg, 2013.

14. J. M. Daughton **GMR applications**. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 192, pág. 334-342. 1999.
15. J. Mathon, Murielle Villeret and D M Edwards **Exchange coupling in magnetic multilayers: effect of partial confinement of carriers**. *J. Phys.: Condens. Matter* Vol.4, pág. 9873-9892. 1992.
16. J. d'Albuquerque e Castro, M.S. Ferreira, and R. B. Muniz **Theory of the exchange coupling in magnetic metallic multilayers**. *Physical Review B* Vol.49, pág. 16062. 1994.
17. Gautier F., **Magnetism of Metals and Alloys**, ed. M. Cyrot, North-Holland, 1982.
18. Marder Michael P. **Condensed Matter Physics**. John Wiley and Sons, Inc., 2000.
19. Economou E. N. **Springer Series in solid State Sciences-Greens Functions in Quantum Physics**. Vol. 7, 3.ed. Springer-Verlag. Berlin, 2006.
20. Doniach S. and Sondheimer E. H., **Green's Functions for Solid State Physicists**. Imperial College Press. 1998.
21. J. Mathon, Murielle Villeret, R.B.Muniz, J. d'Albuquerque e Castro and D M Edwards **Exchange coupling in magnetic multilayers: effect of partial confinement of carriers**. *Phys. Rev. Lett.* Vol.74, pág. 3696. 1995.
22. Wong R. **Asymptotic approximations of integrals, Vol.34** de Classics in Applied Mathematics. SIAM, 2001.
23. P. Grunberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.N. Brodsky, y H. Sowers, *Phys. Rev. Lett.* **57**, pág. 2442. 1986.
24. S.S.P. Parkin, N. More, y K.P. Roche, *Phys. Rev. Lett.* **64**, pág. 2304. 1990.

# ANEXOS

## A - Matriz de consistencia

| PROBLEMA  | OBJETIVOS  | HIPOTESIS  | VARIABLES   | METODOLOGÍA  | INDICADORES  |
|---|--|--|---|--|--|
| <p><b>Problema general:</b> ¿Es posible que el método de fase estacionaria permite calcular la integral en el espacio recíproco ?</p> <p><b>Problemas específicos:</b><br/>¿Es posible haciendo el uso del método de fase estacionaria resolver la integral asintótica de la variación de la energía electrónica total?</p> | <p><b>Objetivo general:</b> Calcular el comportamiento en la región asintótica de la variación de la energía electrónica total haciendo uso del método de fase estacionaria.</p> <p><b>Objetivo específicos:</b> Identificar el comportamiento oscilatorio de la variación de la energía electrónica total de impurezas en ligas de metales de transición.</p> | <p><b>Hipótesis general:</b> El comportamiento de la variación de la energía electrónica total de una impureza en diferentes planos del sistema, con el origen de las energías localizadas en el volumen, haciendo uso del método de fase estacionaria.</p> <p><b>Hipótesis específicas:</b> El método de fase estacionaria en multicapas magnéticas nos permite encontrar el comportamiento oscilatorio de la variación de la energía electrónica total, en el límite asintótico.</p> | <p><b>Variable independiente:</b><br/>Variación de la energía electrónica total del sistema.</p> <p><b>Variable dependiente:</b><br/>Variación de la densidad de estados del sistema.</p> | <p>El tipo de investigación será aplicada, cuantitativa y transversal.</p> <p>El diseño de la investigación a desarrollar es teórico. Primeramente, consideramos la aproximación de enlace fuerte considerando la integral de transferencia apenas entre los primeros vecinos. En segundo lugar, la presencia de impurezas sustitucionales en el volumen modifica su densidad de estados.</p> <p>Aplicación del método de fase estacionaria para determinar la variación de la energía electrónica total.</p> <p>aplicamos el método de fase estacionaria para determinar su comportamiento en la región asintótica.</p> | <p>Cálculos analíticos y numéricos para determinar la variación de la energía electrónica total.</p> <p>La presencia de impurezas sustitucionales en el volumen modifica su densidad de estados.</p> <p>Aplicación del método de fase estacionaria para determinar la variación de la energía electrónica total.</p> |