



Universidad Nacional Mayor de San Marcos

Universidad del Perú. Decana de América

Dirección General de Estudios de Posgrado

Facultad de Ciencias Físicas

Unidad de Posgrado

**Calor específico en la fase antiferromagnética de los
borocarburos RNi_2B_2C ($R=Gd, Ho, Er$)**

TESIS

Para optar el Grado Académico de Magíster en Física con
mención en Física del Estado Sólido

AUTOR

John Godofredo MIRANDA RAMOS

ASESORES

Jaime Francisco VENTO FLORES

Lorenzo MALPARTIDA CONTRERAS

Lima, Perú

2016



Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual - Sin restricciones adicionales

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

Usted puede distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir del documento original de modo no comercial, siempre y cuando se dé crédito al autor del documento y se licencien las nuevas creaciones bajo las mismas condiciones. No se permite aplicar términos legales o medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otros a hacer cualquier cosa que permita esta licencia.

Referencia bibliográfica

Miranda, J. (2016). *Calor específico en la fase antiferromagnética de los borocarburos RNi_2B_2C ($R=Gd, Ho, Er$)*. [Tesis de maestría, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas, Unidad de Posgrado]. Repositorio institucional Cybertesis UNMSM.

ACTA DE SUSTENTACION DE TESIS PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE
MAGÍSTER EN FÍSICA CON MENCIÓN EN FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO

A los dieciséis días del mes de agosto del año dos mil dieciséis, siendo las cuatro de la tarde, se reunió el Jurado Examinador, en el auditorio 304 de la Unidad de Posgrado de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, presidido por el señor Dr. Carlos Vladimir Landauro Sáenz como presidente, y con la asistencia de los siguientes miembros del Jurado Examinador:

Dr. Carlos Vladimir Landauro Sáenz	(Presidente)
Dr. Chachi Rojas Ayala	
Dr. Ricardo Enrique Moreno Briones	
Dr. Justiniano Quispe Marcatoma	(Suplente)
Dr. Jaime Francisco Vento Flores	(Asesor)
Mg. Lorenzo Malpartida Contreras	

Para la sustentación oral y pública del trabajo de Tesis para optar el Grado Académico de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido, del bachiller John Godofredo Miranda Ramos con código N° 08137002.

Después de darse lectura al expediente de Grado en el que consta haberse cumplido con todas las disposiciones reglamentarias, los señores Miembros del Jurado Examinador, atendieron a la exposición de la Tesis titulada:

“Calor Específico en la Fase Antiferromagnética de los Borocarburos RNi_2B_2C ($R=Gd, Ho, Er$)”

Y formuladas las preguntas, éstas fueron absueltas por el graduando.

Acto seguido, en privado, el Jurado Examinador procedió a la calificación. El Presidente determinó el promedio de la calificación, obteniendo como resultado de:

..... QUINCE (15) BUENO

A continuación el Presidente del Jurado Examinador recomienda que la Facultad de Ciencias Físicas proponga que se le otorgue el Grado Académico de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido, al bachiller John Godofredo Miranda Ramos.

Siendo las ... 18 ... con ... 20 ... minutos, se levantó la sesión; recibiendo el graduando las felicitaciones de los señores Miembros del Jurado Examinador y público asistente.

Los Miembros del Jurado Examinador suscriben el Acta de sustentación de tesis en Lima, a los dieciséis días del mes de agosto del año dos mil dieciséis.

Presidente del Jurado: Dr. Carlos Vladimir Landauro Sáenz

Miembro del Jurado: Dr. Chachi Rojas Ayala

Miembro del Jurado: Dr. Ricardo Enrique Moreno Briones

Miembro del Jurado: Dr. Justiniano Quispe Marcatoma

Asesor de Tesis: Dr. Jaime Francisco Vento Flores

Co Asesor de Tesis: Mg. Lorenzo Malpartida Contreras

Dedicado a toda mi familia.

Agradecimientos

Al doctor Jaime Francisco Vento Flores por su orientación y exigencia para terminar la tesis.

Al magíster Maximo Poma Torres por facilitarme el trabajo en la área de administración.

A los docentes Emilio Medrano Atencio y Lorenzo Malpartida por brindarme su disposición de Laboratorio de Cristales Reales y Aleaciones Metálicas, para realizar este trabajo.

A mis amigos Erich Manrique Castillo, Mauro Quiroga Agurto, Galo Patiño Camargo y Felipe Navarro Reyes, quienes me apoyaron en cuanto al manejo de Latex.

Al doctor Ángel Bustamante Domínguez por su confianza para seguir laborando en la administración.

También no puedo dejar de agradecer a todos mis compañeros del área administrativa.

De manera especial mi gratitud a la asociación de Familia Zúñiga y Riberos por apoyarme con la beca para la redacción y sustentación de tesis.

Resumen

En esta tesis estudiamos los compuestos cuaternarios llamados borocarburos de níquel, los cuales tienen la fórmula general RNi_2B_2C donde R es una tierra rara. Esta investigación la hacemos en el marco de una aproximación lineal de la teoría de ondas de espín. Específicamente, realizamos cálculos analíticos de: relación de dispersión, energía interna y calor específico, en presencia de campo magnético externo. Estos materiales presentan diagramas de fases magnéticas muy variadas e interesantes. Los resultados obtenidos son contrastados con resultados experimentales obtenidos, por otros investigadores, con monocristales de RNi_2B_2C con $R=Ho, Gd, Er$. El calor específico magnético de los compuestos, $GdNi_2B_2C$, $ErNi_2B_2C$ y $HoNi_2B_2C$, respectivamente, es ploteado en función de la temperatura, haciendo variar el campo magnético externo.

Desde su descubrimiento, en 1994, cuando la familia de borocarburos de níquel fue sintetizada, ha revivido un profundo interés, tanto teórico como experimental, sobre un tema que ya era debatido: la coexistencia entre la fase superconductor y fases de ordenamiento magnético de largo alcance.

Podemos dar una conclusión: que la teoría de ondas de espín permite dar resultados confiables del aporte de los magnones libres al calor específico a temperaturas bajas, en presencia de campo magnético externo, así como es ampliamente estudiado sin el campo magnético externo.

Palabras clave:

Borocarburos de níquel; ondas de espín; calor específico magnético.

Abstract

We study quaternary compounds known as nickel borocarbides, which have the RNi_2B_2C general formula, where R stands for a rare earth. Our research is based on a linear approximation for the spin wave theory; specifically, we analytically perform calculations concerning the dispersion relation, internal energy, and specific heat, considering the presence and absence of an external magnetic field. These materials have many varied diagrams as well as interesting magnetic phases. The analytically obtained results are contrasted with experimental results obtained by other researchers for RNi_2B_2C with (R=Ho, Gd, Er). The magnetic specific heat for $GdNi_2B_2C$, $ErNi_2B_2C$ and $HoNi_2B_2C$, respectively, is plotted as a function of temperature by varying the external magnetic field. Since its discovery in 1994, when the nickel borocarbide family was synthesized, a deep theoretical, experimental interest about a long-time issue involving them has revived: the coexistence of superconductivity and long range magnetic ordering. We show the spin wave theory can give reliable results on the free-magnons contribution to the specific heat at low temperatures, in the presence of external magnetic field as well as without it.

Keywords

borocarbides; spin wave; specific magnetic heat.

Epígrafe

La ciencia es la progresiva aproximación del hombre al mundo real.

Max Planck

Es un hecho que el hombre tiene que controlar la ciencia y chequear ocasionalmente el avance de la tecnología.

Thomas Henry Huxley

Índice

Carátula	i
Jurado Examinador	ii
Dedicatoria	ii
Agradecimientos	iv
Resumen	v
Abstract	vi
Epigrafe	vii
Lista de Figuras	x
Lista de Tablas	xii
1. Introducción	1
2. Borocarburos de níquel RNi_2B_2C	3
2.1. Estructura cristalina	3
2.2. Ordenamiento magnético y campo eléctrico cristalino	4
2.3. Superconductividad	6
2.4. Coexistencia de superconductividad y ordenamiento magnético	7
2.5. Estructuras magnéticas	8
2.5.1. Estructura magnética de $ErNi_2B_2C$	9

2.5.2.	Estructura magnética de $GdNi_2B_2C$	11
2.5.3.	Estructura magnética de $HoNi_2B_2C$	12
2.6.	Diagramas de fase magnética	13
2.6.1.	Diagramas de fase magnética $ErNi_2B_2C$	14
2.6.2.	Diagramas de fase magnética $GdNi_2B_2C$	14
2.6.3.	Diagramas de fase magnética $HoNi_2B_2C$	18
3.	Teoría de ondas de espín	20
3.1.	Hamiltoniano del sistema	20
3.1.1.	Transformación de Holstein-Primakoff	21
3.1.2.	Aplicación de la transformación de Holstein-Primakoff	22
3.2.	Diagonalización del hamiltoniano con el método de Bogoliubov	27
3.3.	Densidad de estados sin campo magnético externo	30
3.4.	Densidad de estados con un campo magnético externo	31
3.5.	Energía interna sin campo magnético externo	32
3.6.	Energía interna con campo magnético externo	32
4.	Cálculos analíticos del calor específico	33
4.1.	Calor específico sin campo magnético externo	33
4.2.	Cálculo del calor específico $C_m(T, H)$ con campo magnético H_{ext}	36
5.	Resultados: Aplicación e interpretaciones físicas	41
5.1.	Datos experimentales	41
5.2.	$GdNi_2B_2C$	41
5.3.	$ErNi_2B_2C$	43
5.4.	$HoNi_2B_2C$	45
6.	Conclusiones y perspectivas	51

Lista de Figuras

2.1.	Estructura cristalina del borocarburo de níquel tetragonal de cuerpo centrado	4
2.2.	Temperaturas críticas para las fases superconductor y antiferromagnética de RNi_2B_2C . . .	9
2.3.	$ErNi_2B_2C$. Densidad de ondas de espín transversal, espines a lo largo del eje b y c , y modulada en el eje a	10
2.4.	$ErNi_2B_2C$: Estructura de la densidad de onda de espín en las dos transiciones magnéticas .	10
2.5.	Estructuras magnéticas de $GdNi_2B_2C$	11
2.6.	Estructura magnética de $GdNi_2B_2C$: Momento magnético a lo largo de los ejes b y c	11
2.7.	Estructura magnética de $HoNi_2B_2C$: commensurable antiferromagnética, incommensurable helicoidal e incommensurable modulada	12
2.8.	Estructura magnética de $HoNi_2B_2C$	13
2.9.	Diagramas de fase para el $ErNi_2B_2C$: magnética y metamagnética.	15
2.10.	Diagrama de fase de $GdNi_2B_2C$: Campo H paralelo al eje a y c	17
2.11.	Diagramas de fase magnética de $HoNi_2B_2C$	18
3.1.	Estructura cristalina del borocarburo de níquel, tetragonal de cuerpo centrado	23
5.1.	$C_{mag}(J/molK)$ de $GdNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 0kOe$, la línea continua corresponde a resultado teórico, y las \times corresponden a los valores experimentales	42
5.2.	$C_{mag}(J/molK)$ de $GdNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 2kOe$	43
5.3.	$C_{mag}(J/molK)$ de $GdNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 10kOe$	44
5.4.	$C_{mag}(J/molK)$ de $GdNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 20kOe$	44
5.5.	$C_{mag}(J/molK)$ de $ErNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 0kOe$	45
5.6.	$C_{mag}(J/molK)$ de $ErNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 5kOe$	46
5.7.	$C_{mag}(J/molK)$ de $ErNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 10kOe$	46

5.8. $C_{mag}(J/molK)$ de $ErNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 14kOe$	47
5.9. $C_{mag}(J/molK)$ de $HoNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 0kOe$	47
5.10. $C_{mag}(J/molK)$ de $HoNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 2.5kOe$	48
5.11. $C_{mag}(J/molK)$ de $HoNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 5kOe$	48
5.12. $C_{mag}(J/molK)$ de $HoNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 10kOe$	49

Lista de Tablas

2.1. Distribución de momentos magnéticos cuando se tiene un campo magnético aplicado a lo largo del eje fácil con un ángulo θ respecto al plano ab	17
5.1. $GdNi_2B_2C;H,\Delta,D$	42
5.2. $ErNi_2B_2C;H,\Delta,D$	45
5.3. $HoNi_2B_2C;H,\Delta,D$	49

Capítulo 1

Introducción

En esta tesis investigamos la contribución magnética de los RNi_2B_2C (debido a los magnones libres) al calor específico; por consiguiente, la comparación de los calores específicos magnéticos medidos y calculados (este último se basa en la teoría de ondas de espín) se llevó a cabo solo para el límite de campo magnético bajo. Nuestra hipótesis de trabajo a ser considerada es la siguiente: Al aplicarse un campo magnético externo, el ordenamiento magnético dentro de una fase superconductor permanente permanece inalterable, por lo tanto, se puede describir el sistema con un hamiltoniano de espín. Esta hipótesis tiene sustento en una medida macroscópica del calor específico de los RNi_2B_2C [1].

La principal motivación para este trabajo es la búsqueda de un marco teórico para algunas propiedades físicas de la serie borocarburos de níquel, una familia de compuestos con unidad de fórmula química RNi_2B_2C , siendo $R=(Gd, Ho, Er)$. Nuestro objetivo principal es proporcionar un modelo teórico para el tratamiento de interacción entre momentos magnéticos en presencia de la superconductividad; el formalismo puede servir para una generalización del tratamiento de los superconductores antiferromagnéticos de diferentes estructuras. Nuestros resultados teóricos están en un aceptable acuerdo con evidencias experimentales, obtenidas con monocristales, por M. EL Massalami *et al.* (2004) y (2010) [1]. Evidentemente, también consideraremos los límites de nuestra propuesta. En este sentido debemos indicar que un precedente teórico importante para este trabajo lo constituye la tesis doctoral [2].

En el capítulo 2 se proporcionan conceptos generales de los borocarburos de níquel; se presentan los

diagramas de fase y las estructuras magnéticas de los compuestos en estudio. En el capítulo 3 planteamos la hipótesis de trabajo. Aplicando un campo magnético externo, el ordenamiento magnético dentro de una fase superconductora permanece inalterable, por lo tanto se puede describir el sistema con un hamiltoniano de espín. Entonces podemos decir que, desde un punto de vista teórico, los borocarburos de níquel constituyen un test riguroso para las teorías de superconductores antiferromagnéticos; esto es debido a los parámetros que pueden ser experimentalmente ajustados con precisión [3,4]. Por consiguiente, proponemos un modelo teórico que nos describirá las propiedades magnéticas; nuestro hamiltoniano es expresado en términos de operadores de espín que describen la interacción entre espines de un mismo plano, A o B . También consideramos la interacción entre espines de planos diferentes A a B y viceversa. Considerando el campo de anisotropía H_{An} como un campo efectivo, el cual expresa el efecto de campo eléctrico cristalino que orienta a los momentos magnéticos en la dirección del eje fácil. Luego, transformamos el hamiltoniano utilizando la aproximación de ondas de espín y aplicando transformada de Fourier y transformada de Bogoliubov. Este modelo descrito en hamiltoniano de espín se desarrollará utilizando la linealización de ondas de espín, a efecto de este desarrollo se obtendrá la relación de dispersión, que está en términos de energía que nos permitirá calcular el calor específico magnético de los magnones. En el capítulo 4 se proporcionan cálculos analíticos para el calor específico, tanto en la presencia de un campo magnético externo como en la ausencia de dicho campo. En el capítulo 5 se hace una comparación detallada entre las predicciones teóricas y los datos experimentales sobre las curvas de calor específico en función de la temperatura. En el capítulo 6 tenemos las conclusiones de esta investigación y proponemos una perspectiva de trabajo futuro.

Capítulo 2

Borocarburos de níquel RNi_2B_2C

Los borocarburos de níquel RNi_2B_2C . Son una familia de compuestos con unidad de fórmula química RNi_2B_2C , donde R representa Sc, Y, Lu, Th o un elemento de tierra rara.

En este capítulo se describen los aspectos generales de los borocarburos de níquel: antecedentes históricos, origen del compuesto cuaternario intermetálico, descubrimiento, fases magnéticas, estructuras magnéticas, coexistencia de las propiedades magnéticas y superconductoras. Asimismo, determinamos los rangos de temperatura y de campo magnético externo de las diferentes fases, lo cual nos permitirá tener la información necesaria para plantear nuestra hipótesis de trabajo.

2.1. Estructura cristalina

Estos compuestos cuaternarios presentan una estructura tetragonal de cuerpo centrado con grupo de simetría espacial $I4/mmm$. Los parámetros de la red son muy similares en todos los compuestos de la familia, con $a = b \approx 3.5 \text{ \AA}$ y $c \approx 10.5 \text{ \AA}$ los cuales fueron determinados experimentalmente. La estructura de borocarburos de níquel se compone de capas de Ni_2B_2 que se alternan con planos de átomos RC apilados a lo largo del eje c . Tiene una estructura altamente anisotrópica con una razón c/a aproximadamente 3. En un compuesto magnético existe un campo de anisotropía que orienta la imanación a lo largo de ciertos ejes cristalográficos definidos, llamados dirección de fácil imanación [48]. Estos compuestos tienen proporciones definidas de sus componentes y es factible producirlos en monocristales de muy buena calidad. [5, 6].

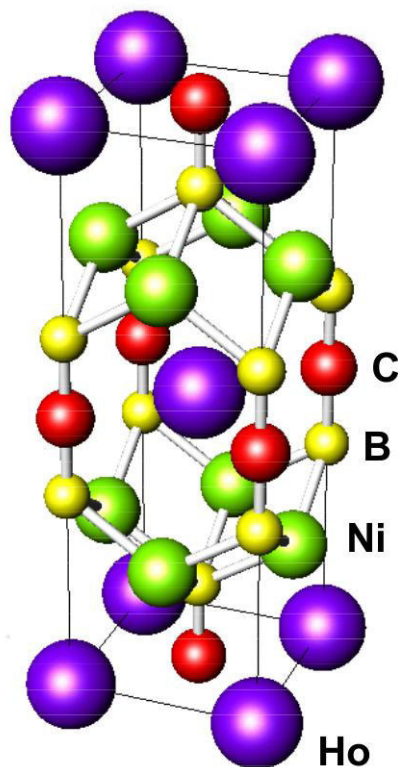


Figura 2.1: Estructura cristalina del borocarburo de níquel: tetragonal de cuerpo centrado. El esquema indica las posiciones atómicas [7]

2.2. Ordenamiento magnético y campo eléctrico cristalino

La estructura magnética en el estado fundamental de algunos borocarburos de níquel, incluyendo todo superconductor magnético RNi_2B_2C , se caracteriza por: los valores del momento magnético $\langle \mu \rangle$ y su dirección con respecto al eje cristalográfico de orden magnético de R ; así como por los momentos magnéticos de los primeros vecinos. Además, otra propiedad característica es su propagación del vector de onda \vec{q} que puede ser commensurable o incommensurable con respecto a la estructura de la red. El valor de $\langle \mu \rangle$ es el resultado de la interacción entre anisotropía de ión singular debido a CEF (Crystal Electric Field) y la interacción de intercambio de RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida). La dirección local de momentos magnéticos de R

son gobernados por CEF (con excepción para el caso de $R = Gd$). Hay dos tipos de estructuras magnéticas: paralelo al eje c o perpendicular al eje c . Toda la familia RNi_2B_2C tiene iones trivalentes de tierras raras, con una capa $4f$ incompleta, $R=(Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm)$. Respecto a la fase antiferromagnética, la temperatura de Néel tiene la siguiente relación

$$T_N \propto I^2 \xi \quad (2.1)$$

donde I es la integral de intercambio [8,9]

$$\xi = (g - 1)^2 J(J + 1) \quad (2.2)$$

ξ es el factor de Gennes y g es el factor de Landé

$$g = 1 + \frac{J(J + 1) + S(S + 1) - L(L + 1)}{2J(J + 1)} \quad (2.3)$$

el cual es una función de los números cuánticos: momento angular orbital L , espín total S y momento angular total J asociados a los electrones de las capas incompletas $4f$ de los iones de las tierras raras; los valores altos de T_N en los borocarburos se deben a la fuerte interacción de intercambio de los momentos magnéticos y los electrones de conducción. Por ejemplo, la estructura de $HoNi_2B_2C$ a bajas temperaturas es antiferromagnética con dos mediciones diferentes entre $T_N = 5$ K y $T_{IC} = 6$ K [10–15]. Para Gd, Tb, Er y Tm las estructuras magnéticas son conmensurables a lo largo de todo el intervalo donde el ordenamiento magnético existe. Los borocarburos de níquel de Pr, Dy y Ho tienen momento a lo largo del eje cristalográfico de dirección $(1, 1, 0)$, con estructura conmensurable antiferromagnética. Para entender la interacción entre momentos magnéticos, son las transiciones metamagnéticas observadas aplicando campo magnético externo. Dependiendo de la dirección del campo magnético externo con respecto a las direcciones de simetría del cristal aparecen una serie de espín flop. Es decir, cuando se aplica un campo externo a lo largo del eje fácil de un antiferromagneto, la fase de Néel puede convertirse en inestable en relación con la configuración de la dirección de magnetización de subred que se alinea aproximadamente perpendicular al campo [49].

Respecto al campo eléctrico cristalino (CEF), se debe indicar que la anisotropía magnética está determinada localmente por dicho campo. Otra característica de los iones de tierras raras es que son trivalentes

R^{+3} , con la configuración electrónica $[Xe]4f^N$.

Las propiedades magnéticas se deben a los electrones de capa incompleta 4f. El CEF obedece al potencial electrostático generado por la carga eléctrica de los iones vecinos más cercanos.

El valor de \vec{u} es el resultado de la interacción entre la anisotropía de ión simple debido al CEF y la interacción de intercambio RKKY. La dirección local de momentos magnéticos es gobernado por el CEF sobre R .

2.3. Superconductividad

La superconductividad de los borocarburos de níquel fue descubierta en 1994, cuando se reportó los resultados sobre una muestra policristalina del YNi_4B . El compuesto ternario YNi_4B [55] mostró señales débiles de superconductividad; la estabilización de fase superconductora puede provenir de un elemento distinto de Y, Ni y B. Con el fin de probar esta hipótesis, 0.2 en C por unidad de fórmula fue deliberadamente añadido a un lingote de YNi_4B y refundido. Como era de esperar, $YNi_4BC_{0.2}$ mostró superconductividad a 12 K con resistencia cero. A través de microscopía electrónica y análisis de rayos X quedó descartado la posibilidad de que el aumento de superconductividad se debió a Y_2C_3 , que es un superconductor conocido. De los compuestos de composición nominal, el $YNi_2B_3C_{0.2}$ exhibió mejor la propiedad superconductora. También quedó confirmada, mediante la preparación de materiales con diferentes combinaciones de los cuatro elementos Y, Ni, B y C, la existencia de una mayor fase superconductora a una temperatura elevada de alrededor de unos 13 K en el sistema YNiBC. Estos importantes resultados se dieron a conocer por primera vez en dos conferencias internacionales [53, 54] [16]. Después se reportó sobre la superconductividad en el compuesto multifase $YPd_5B_3C_{0.35}$ [17] con temperatura de transición $T_C = 23K$ y el compuesto de fase simple RNi_2B_2C $R=(Y, Lu, Tm, Er, Ho)$ con $T_C= 15.5, 16.5, 11, 10.5$ y 8 K, respectivamente. Los borocarburos de níquel comparten características físicas con otras familias de compuestos superconductores ternarios magnéticos, llamados los boruros de rodio RRh_4B_4 y las fases Chevrel RMo_6S_8 , donde R representa tierras raras; son compuestos donde coexisten la superconductividad y orden ferromagnético, para una temperatura

de Curie T_c ($T_c < T_{S2}$ transición de superconductor normal) respectivamente.

En general, es conocido que varios borocarburos de níquel se convierten en superconductor a temperaturas entre 3 K y 16 K.

2.4. Coexistencia de superconductividad y ordenamiento magnético

Los compuestos RNi_2B_2C para $R=Pr, Nd, Gd, Tb, Dy, Ho, Er$ y Tm tienen propiedades magnéticas y superconductoras en el mismo intervalo de temperaturas, y coexisten a nivel microscópico. La característica común entre magnetismo y superconductividad es la presencia de electrones con diferentes grados de localización como: **a)** electrones localizados en los orbitales $4f$ semilenos de las tierras raras responsables de las propiedades magnéticas, con fuerte anisotropía; **b)** electrones de los orbitales d de metales de transición, que forman una banda de conducción y producen un comportamiento metálico. Esta separación entre carácter magnético y metálico y una débil interacción entre las dos propiedades, distingue a los borocarburos de níquel de sus precedentes superconductores magnéticos (boruros de rodio RRh_4B_4 y fases Chevrel RMo_6S_8). Otros materiales muestran propiedades superconductoras y magnéticas con un sólo grado de localización de electrones (tales como los cupratos, superconductores que se estudian con un diferente tratamiento teórico).

La primera investigación teórica de la coexistencia entre superconductividad y ordenamiento magnético fue realizada en 1957 por V. L. Ginzburg [18], quien consideró que esta coexistencia no era posible. Ginzburg en realidad demostró que el campo magnético en un ferromagneto es de varios órdenes de magnitud mayor que el campo crítico superior de un superconductor típico; incluso, sin el apoyo de una teoría microscópica, afirmó que el efecto del surgimiento del ordenamiento ferromagnético sería suprimir completamente la superconductividad por debajo de la temperatura de Curie, T_C . Ese mismo año, con la formulación de la teoría BCS por J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer [19, 20] fue posible estudiar la superconductividad desde un punto de vista microscópico; esto produjo un increíble interés en la actividad teórica en temas relacionados con la superconductividad. En 1959, P. W. Anderson explicó el efecto de

pequeñas impurezas magnéticas en las propiedades superconductoras con argumentos de simetría [21]. Dos años más tarde, A. A. Abrikosov y L. P. Gor'kov [22] explicaron el efecto de las impurezas paramagnéticas, que eran mucho más perjudiciales; ellos demostraron que la falta de simetría de inversión temporal afectaba negativamente a la superconductividad. Por otro lado, Anderson y H. Suhl señalaron que la aparición de la superconductividad afectaría fuertemente la interacción entre los momentos magnéticos locales, posiblemente inhibiendo el ordenamiento ferromagnético [23]. A finales de 1961, el magnetismo y la superconductividad se consideraban fenómenos mutuamente excluyentes y que parecían competir fuertemente. W. Baltensperger y S. Strassler [24], en 1963, fueron los primeros en afirmar la posibilidad de la coexistencia entre la superconductividad y el ordenamiento magnético de largo alcance, incluso si estos estados carecieran de simetría de inversión temporal. El problema de la coexistencia fue abordado con éxito en un experimento en 1977, cuando se descubrieron dos familias de materiales superconductores y magnéticamente ordenados [3, 4]: RRh_4B_4 y RMo_6S_8 conocidos, respectivamente, como boruros de rodio y fases Chevrel, que comparten las características de ser compuestos ternarios, de tierras raras y metálicos. Los iones de tierras raras son responsables de las propiedades magnéticas y los electrones exteriores, de los átomos del metal que experimentan una transición superconductoras [26].

2.5. Estructuras magnéticas

El primer reto para la construcción del modelo teórico es la existencia de gran variedad de estructuras magnéticas observadas experimentalmente: antiferromagnética incommensurable, densidad de ondas de espín, hélice, antiferromagnética commensurable, espín flop, etc. Esta amplia variedad de estructuras magnéticas observadas en diferentes iones de tierras raras indica que la interacción RKKY juega un papel importante en la estabilización de la estructura magnética. La estructura magnética es controlada por espines de conducción que varían de un material a otro; de ese modo diferentes tierras raras se estabilizan en diferentes estructuras [27].

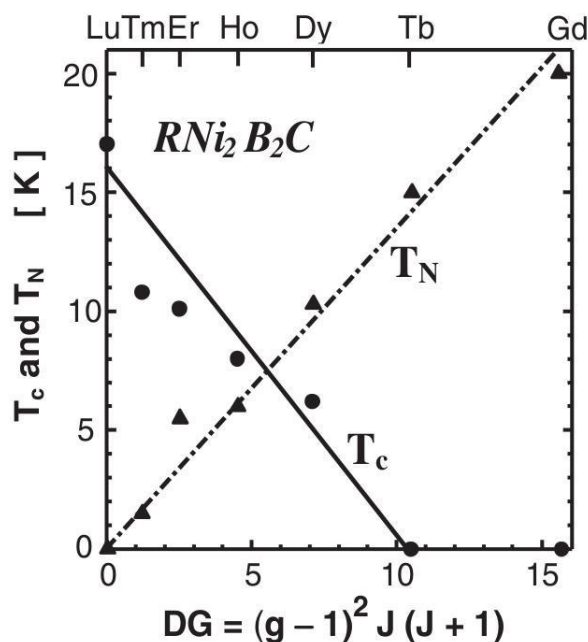


Figura 2.2: Las temperaturas críticas para la superconductividad T_c , y para antiferromagnético T_N , RNi_2B_2C son compuestos con $R=(Lu,Tm,Er,Ho,Dy,Tb,Gd)$. DG es el factor de Gennes; g , factor de Landé; y J , momento angular total del ion R^{+3} [6].

2.5.1. Estructura magnética de $ErNi_2B_2C$

En el $ErNi_2B_2C$ (Figura 2.3) coexiste la superconductividad con la fase ferromagnética débil que aparece a una temperatura $T_{WFM} = 2.3$ K [57]. A temperaturas bajas aparecen los vórtices espontáneamente, sin campo externo aplicado [58]. Mediante la difracción de neutrones se demuestra que el $ErNi_2B_2C$ atraviesa dos transiciones magnéticas por debajo de $T_C = 11$ K. En este compuesto, los momentos magnéticos de los iones Er^{+3} se ordenan antiferromagnéticamente (AF) a $T_N = 6$ K en una onda de espín transversalmente polarizada; con vector de onda inconmensurable $q = (0.55, 0, 0)$ a lo largo del eje a y con los espines paralelos al eje b . En este superconductor hay, además, una modulación sinusoidal en la amplitud del momento magnético con un vector de onda $q = (0.05, 0, 0)$. Por debajo de T_{WFM} , aparece otra transición magnética a un estado ferromagnético débil WFM (Weak Ferromagnetic) cuya modulación sinusoidal de amplitud del momento magnético pasa a ser cuadrada, como se observa en la figura 2.4

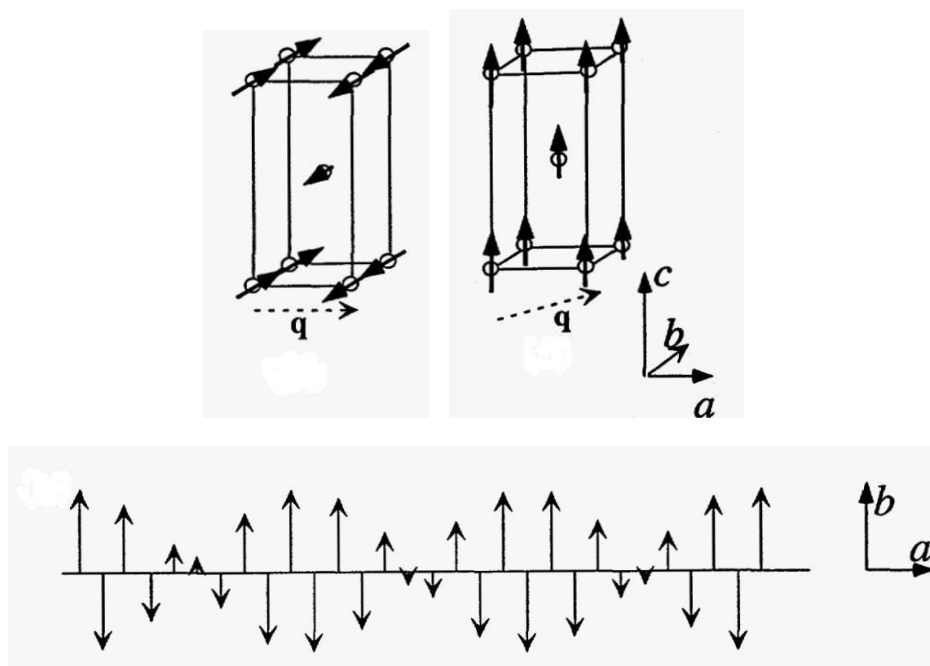


Figura 2.3: $ErNi_2B_2C$: Densidad de ondas de espín transversal, espines a lo largo del eje b y c , respectivamente. Onda de espín modulada a lo largo del eje a . Ver [27].

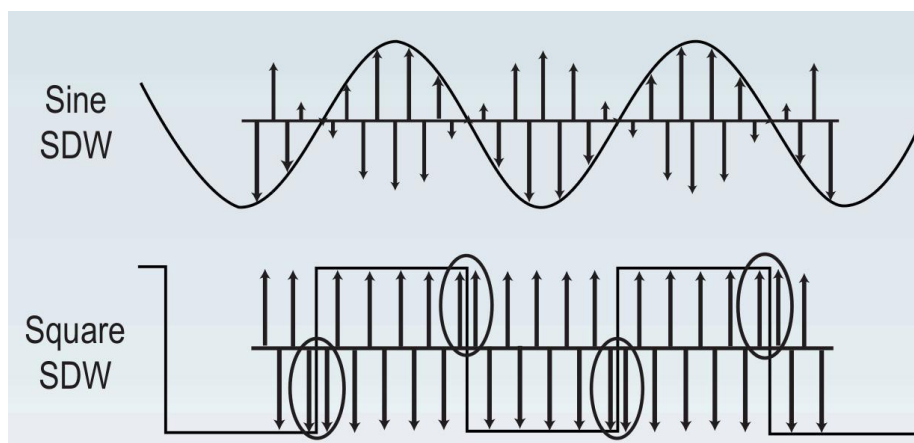


Figura 2.4: : a) modulación sinusoidal(sine SDW) $2.3k < T < 6K$, b) modulación cuadrada(square SDW) $T < 2.3K$ [6].

2.5.2. Estructura magnética de $GdNi_2B_2C$

La estructura magnética de $GdNi_2B_2C$ (Figura 2.5(b)) depende de la temperatura y del campo magnético externo. Se pueden mencionar las siguientes estructuras magnéticas de Gd: espines orientados en dirección del eje c , también con modulación a lo largo del eje $(1,1,0)$, que se muestran en varias celdas unitarias. El ordenamiento magnético para Gd es obtenido con rayos X debido a la absorción de sección transversal de gadolino [59].

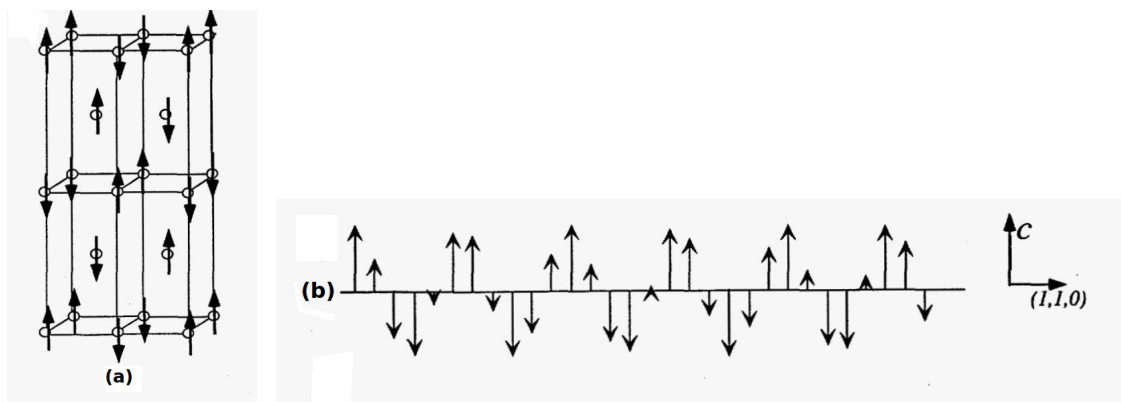


Figura 2.5: Estructuras magnéticas de $GdNi_2B_2C$: (a) Esquema general; (b) Modulada a lo largo del eje $(1,1,0)$ [27].

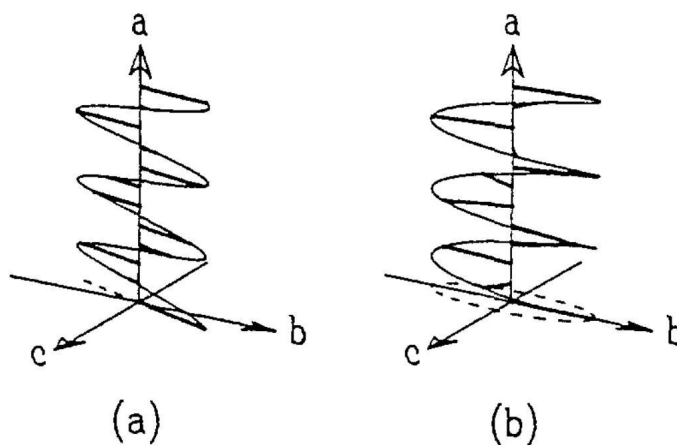


Figura 2.6: Estructura magnética de $GdNi_2B_2C$. Momento magnético a lo largo de los ejes b y c con vector de onda $q_a = 0.55\bar{a}^*$. Las estructuras son: (a) tipo espiral, (b) onda transversal [28].

2.5.3. Estructura magnética de $HoNi_2B_2C$

La estructura cristalina de $HoNi_2B_2C$ (Figura 2.1) $Ho = R$, es tetragonal de cuerpo centrado. El momento magnético del ión de tierras raras es el que genera el orden magnético. La estructura consiste en planos HoC , separado por capa Ni_2B_2 , apilado a lo largo del eje c . Cuatro átomos de Ho se encuentran en los vértices y uno en el centro de la celda tetragonal. Los parámetros de red determinados son $a = 3.51\text{Å}$ y $c = 10.51\text{Å}$.

Mediante difracción de neutrones en el pequeño intervalo de temperatura de 4.5K a 5.5K, en campo magnético cero hay diferentes tipos de estructura magnética en $HoNi_2B_2C$ [5]: commensurable antiferromagnético (CAF) con vector de propagación $\tau_1 = (0,0,1)$ (Figura 2.7) y dos vectores incommensurables (ICM), uno con vector de propagación $\tau_2 = (0,0,0.916)$ c^* y el otro con vector de propagación $\tau_3 = (0.585,0,0)a^*$. El metamagnetismo en $HoNi_2B_2C$ es causado por interacción del potencial tetragonal CEF y RKKY, donde los primeros están alineados a lo largo del momento del eje fácil.

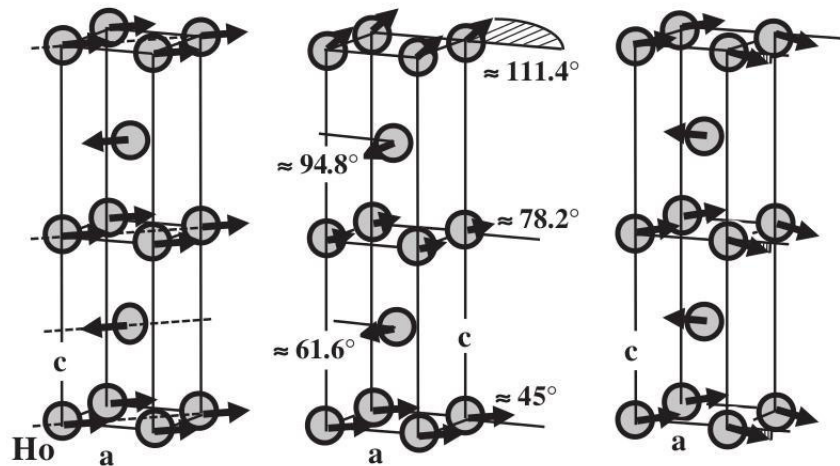


Figura 2.7: Estructura magnética de $HoNi_2B_2C$. Izquierda, commensurable antiferromagnética, con vector de onda $\vec{\tau}_1$; centro, incommensurable helicoidal con vector de onda $\vec{\tau}_2=(0, 0, 0.916)$; derecha, incommensurable modulada con vector de onda $\vec{\tau}_3 = (0.58, 0, 0)$ rlu [6].

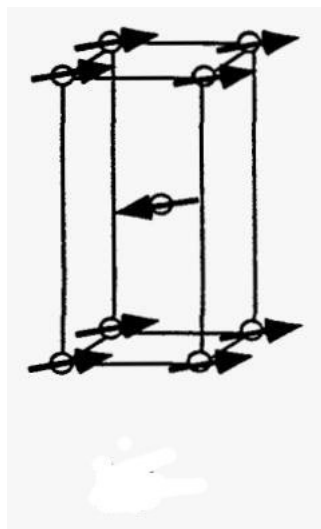


Figura 2.8: Estructura magnética de $HoNi_2B_2C$. Estructura antiferromagnético simple de Ho espines en el plano ab [27].

2.6. Diagramas de fase magnética

Los diagramas de fase magnética H - T de los compuestos intermetálicos RNi_2B_2C se caracterizan por una cascada de transformaciones metamagnéticas. Por otra parte, a excepción de $GdNi_2B_2C$, hay fuerzas anisotrópicas fuertes y la interacción entre estas fuerzas es uno de los mecanismos principales detrás de los rasgos característicos de sus diagramas. El papel de estas fuerzas que compiten se analiza en términos de un hamiltoniano que consiste en el intercambio bilineal, campo eléctrico de un ión monocristalino (CEF), e interacción dipolar. Los cálculos basados en este hamiltoniano están en acuerdo razonable con diagramas de fase H - T y con las fases antiferromagnéticas conmensurables AFM ($R = Pr, Nd, Dy, Ho$): aquí los momentos están acoplados ferromagnéticamente dentro de las capas que están, a su vez, antiferromagnéticamente apiladas unas sobre otras a lo largo del eje c , las estructuras inconmensurables de amplitud modulada ($R = Gd, Er$). En presencia de un campo magnético externo a lo largo del eje fácil, ambos modos magnéticos, tanto el conmensurable como el inconmensurable, sufren transformaciones metamagnéticas que generan un conjunto de diferentes modos magnéticos, cada una con distinto vector de propagación. Como las propiedades magnéticas de baja temperatura se rigen por los espectros de excitación de las cuasipartículas llamadas

magnones; entonces, de acuerdo a la teoría de onda de espín, el surgimiento de una serie de características tales como transformaciones metamagnéticas es una manifestación que depende de las relaciones de dispersión o la densidad de estados de los magnones.

2.6.1. Diagramas de fase magnética $ErNi_2B_2C$

En el diagrama de fase de $ErNi_2B_2C$, que se muestra en la figura 2.9, [29], en campo magnético cero, coexisten las propiedades de superconductividad y antiferromagnético a temperaturas comparables $6K \leq T_c \leq 16K$ y $1.5K \leq T_N \leq 11K$; es superconductor por debajo de $T_c = 10.5K$; es magnético por debajo de $T_N = 6.4K$; y por debajo de $T_{WFM} = 2.3K$, surge un estado ferromagnético débil [30], con una amplitud de onda cuadrada [31,32]. Se han identificado dos estructuras estables con vectores de onda $Q = 11/22a^* \text{ ó } b^*$ en campo cero[5]. En $T_c = 2.3K$ hay igual número de espines con direcciones hacia arriba y hacia abajo, por debajo de T_c uno de las direcciones se hace más poblado conduciendo a un ferromagnetismo débil. Cuando se aplica campo magnético a lo largo de eje fácil $[0 \ 1 \ 0]$, surge la formación de dos diferentes dominios con $Q = n/ma^*$. Cuando incrementa el campo, aumentan los espines en la dirección del campo. En 1.8K, Q cambia de $16/19a^*$ a $4/7a^*$ en el intervalo de $7kOe < H_{ext} < 11kOe$ y siguiendo el cambio a $10/17a^*$, en el rango de $11kOe < H_{ext} < 13kOe$. Aplicando a lo largo de $[0 \ 0 \ 1]$, el campo crítico superior para la fase antiferromagnético es alta 170kOe en 1.8k. Hemos encontrado diferentes transiciones magnéticas ($H < H_{sat}$), aplicando un campo magnético a lo largo del eje fácil $(0,1,0)$ [29, 33–35]. En 2K, ocurren tres transformaciones metamagnéticas: para $H > H_{sat}$, el estado paramagnético se estabiliza; para $T_{FM} < T_W$, ($H < H_1$), la estructura se aproxima como una estructura AFM, por lo que el C_{mag} medida ($T < T_{WFM}$, $H < H_1$). Las curvas experimentales son contrastadas con la curva teórica, (ecuación 4.47).

2.6.2. Diagramas de fase magnética $GdNi_2B_2C$

La estructura magnética en campo cero de $GdNi_2B_2C$ ($T_N = 19,5K$) es una estructura inconmensurable senoidal modulada (con momentos magnéticos a lo largo del eje b y con vector de onda ($\vec{q} = 0.551$)) [37–39]. En $T = 13.5K$, Gd sufre reorientación de sus espines, lo cual conduce a desarrollar un componente adicio-

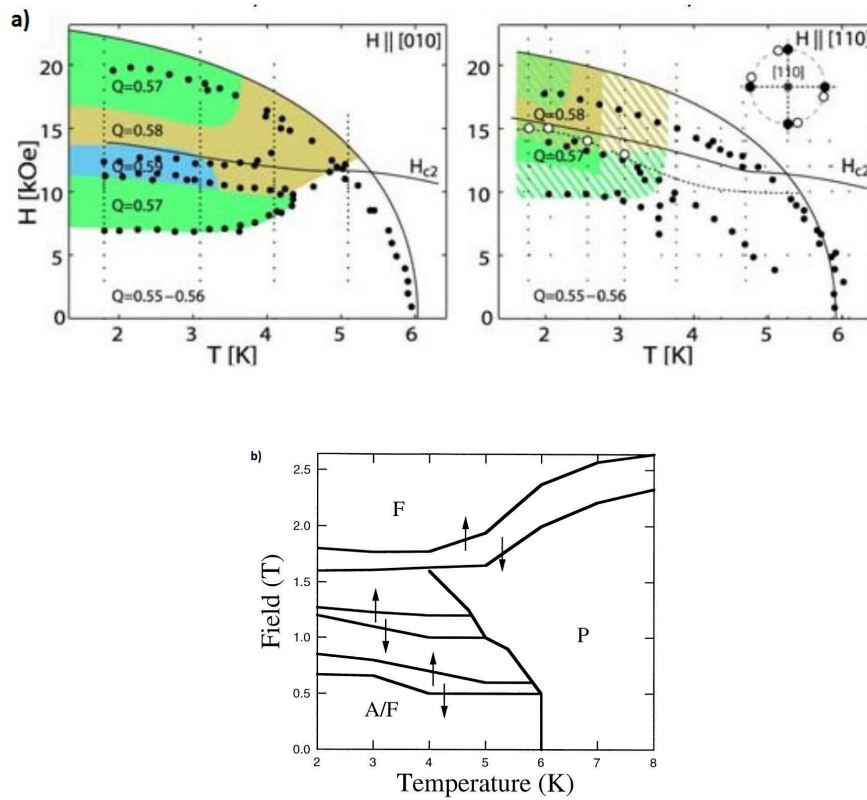


Figura 2.9: Diagramas de fase para el $ErNi_2B_2C$: **a)** Las líneas circulares representan el límite de orden magnético. Los puntos negros mediciones experimentales. Aplicando campo magnético paralelo a $[010]$, se observan cuatro fases commensurables, y aplicando campo magnético paralelo a $[110]$, se observan tres fases commensurables; las áreas rayadas representan la coexistencia de fases. Q , es vector de onda y tiene diferentes valores. El campo crítico superior es H_{C2} . **b)** Metamagnética, en el plano de temperatura y campo magnético paralelo a la dirección $(1,1,0)$. La fase paramagnética saturada en la cual todos los espines son paralelos al campo aplicado F. En la región A/F es incommensurable antiferromagnética. dentro de esta región hay diferentes valores de modulación del eje a . La fase P es paramagnético en todo las transiciones de primer ordenamiento [34].

nal de amplitud modulada transversalmente polarizados a lo largo del eje c [38, 39]. En el diagrama de fase para $H \parallel a$ hay tres transiciones de fase de campo magnético inducido, como se ve en la figura 2.10(a): **1)** el límite de saturación con H_{sat} ; **2)** el límite reorientación con H_R ; **3)** el límite de dominio con H_D . En el diagrama de fase para $H \parallel c$ se muestran dos transiciones, como se en la figura 2.10(b): H_{sat} y H_R . Ninguno de los dos diagramas de fase muestran cascada de transiciones de fase metamagnético que son comunes en $R = (Er, Ho)$; esto se atribuye a la ausencia de características anisotrópicas. La ausencia en $GdNi_2B_2C$ de

superconductividad es comprensible. Como se ve en la (Figura 2.2), escala de Gennes, T_c de $GdNi_2B_2C$ debería ser cero. Además, Gd^{+3} tiene una densidad de carga esférica. Las mediciones de susceptibilidad magnética en monocristales de $GdNi_2B_2C$ confirmó la isotropía magnético de este compuesto y se obtuvo un momento paramagnético eficaz $\mu_p = 8.1\mu_B$ que se aproxima al valor Gd^{+3} ión libre de $7.9\mu_B$ ver el cuadro 7 en [6], mientras que las mediciones de magnetización a bajas temperaturas indican un ordenamiento magnético a temperatura $T_N = 20K$ y una temperatura de transición de espín reorientación $T_R = 14K$ [40]. Por debajo de T_N , tiene estructura incommensurable antiferromagnética con un vector de onda $\vec{q} = (0, 55, 0, 0)$, que está cerca del vector de Nesting. Estos resultados están de acuerdo con estudios de espectroscopía Mössbauer que revelan estructuras agrupadas en forma de espiral a baja temperatura con los momentos magnéticos de espín en el plano bc [41, 42].

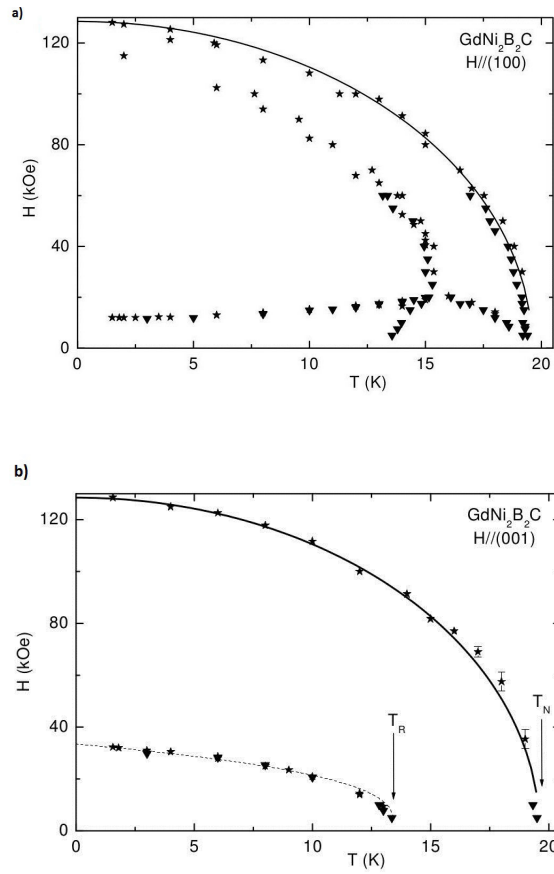


Figura 2.10: Diagrama de fase de $GdNi_2B_2C$: **a)** Campo H paralelo al eje a , **b)** paralelo al eje c , respectivamente, mediante las medidas de magnetización (*) y magnetoestricción (▽) [43].

μ	H_0
$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$H_0 < H_{c1}$
$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$H_{c1} < H_0 < H_{c2}$
$\uparrow\uparrow\rightarrow\uparrow\uparrow\rightarrow$	$H_{c2} < H_0 < H_{c3}$
$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$	$H_{c3} < H_0$

Tabla 2.1: Distribución de momentos magnéticos cuando se tiene un campo magnético aplicado a lo largo del eje fácil con un ángulo θ respecto al plano ab .

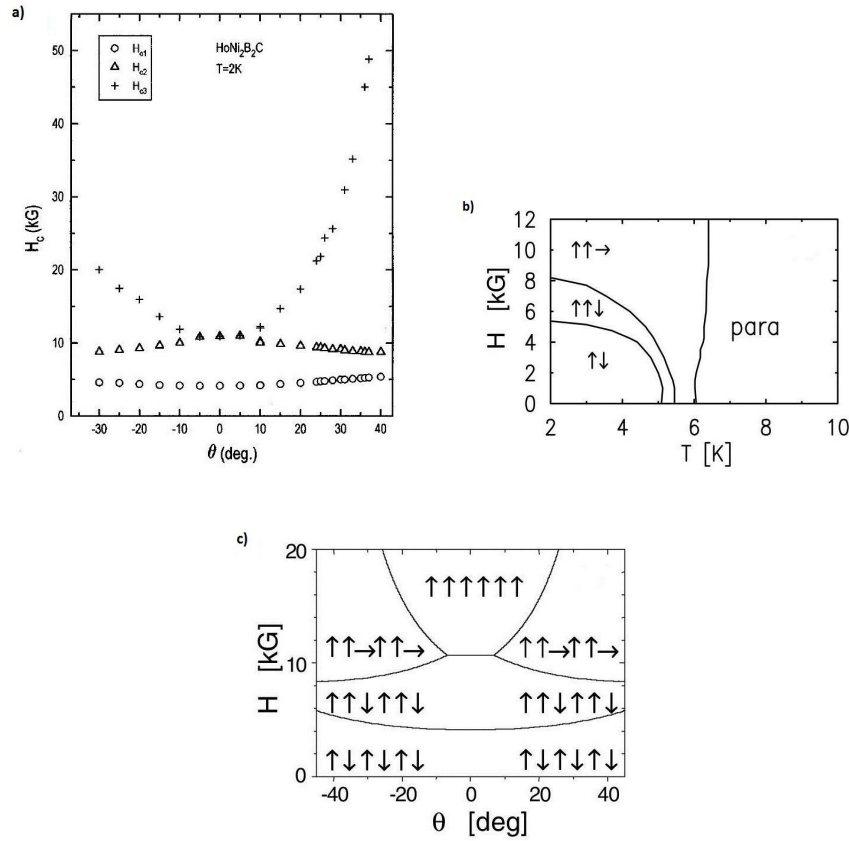


Figura 2.11: Diagramas de fase magnética de $HoNi_2B_2C$: **a)** Campos críticos vs. ángulo entre el plano basal y el eje (1,1,0) [46]: H_{c1} , círculos; H_{c2} , triángulos; H_{c3} ; **b)** Campo aplicado a lo largo del eje tetragonal: $\uparrow\downarrow$ (antiferromagnética), $\uparrow\uparrow$ (ferromagnético saturado), $\uparrow\uparrow\downarrow$ y $\uparrow\uparrow\rightarrow$ (metamagnética fácil (110)); **c)** H vs. θ en $T = 2K$, H perpendicular al eje c , θ ángulo entre el plano ab y el eje magnéticamente fácil (1,1,0) [26, 36].

2.6.3. Diagramas de fase magnética $HoNi_2B_2C$

La estructura magnética de $HoNi_2B_2C$ a campo magnético cero es AFM, donde los ferromagnéticos basales están apilados a lo largo del eje c con vector de onda $\vec{q} = (0,0,1)$. Aplicando un campo magnético a lo largo de eje fácil (1,1,0), el diagrama de fase de $HoNi_2B_2C$ muestra sucesivos campos metamagnéticos inducidos [36, 44, 45] transformando de $\nearrow\swarrow\nearrow$ a $\nearrow\nearrow\swarrow$ en H_1 ; de $\nearrow\swarrow\nearrow$ a $\nearrow\nearrow\searrow$ en H_2 ; y de $\nearrow\swarrow\nearrow$ a $\nearrow\nearrow\nearrow$ en H_{sat} .

Por otro lado, si el campo es aplicado en la dirección de eje fácil con un ángulo θ respecto al plano ab , en

la figura 2.11 de distribución de momentos se observa lo indicado en la Tabla 2.1, donde μ es el momento magnético, H el campo magnético externo. Solo los que están en rango $H < H_{c1}$ son los que se pueden contrastar con la teoría de onda de espín, lo cual es válido para temperaturas y campos de valores bajos.

Capítulo 3

Teoría de ondas de espín

En este capítulo describimos el sistema por un hamiltoniano de espín. Resolvemos el hamiltoniano utilizando la teoría de onda de espín. Para encontrar la relación de dispersión hacemos una transformación de Holstein Primakoff. Haciendo aproximaciones en la series de coseno, y por razones físicas, cuando la temperatura tiende a cero, consideramos una aproximación de segundo orden. También realizamos una diagonalización con el método de Bogoliubov. En el caso de que el campo magnético esté presente planteamos la siguiente hipótesis de trabajo: *Aplicando un campo magnético externo, el ordenamiento magnético dentro de una fase superconductora permanece inalterable*. Esta hipótesis encuentra sustento en mediciones macroscópicas de calor específico [1].

3.1. Hamiltoniano del sistema

La estructura magnética de los borocarburos de níquel con $R(=Gd, Ho, Er)$, en intervalos definidos de temperatura, presenta una fase antiferromagnética como indica el modelo de Néel. La teoría de ondas de espín en los antiferromagnéticos fue desarrollada en los trabajos de Bogoliubov y Tiablijov [47]. Al modelar el antiferromagnetismo consideramos que el cristal está constituido por dos subredes A y B superpuestas una en la otra, de modo que todos los vecinos próximos de cada ión de A son iones de B y viceversa. Tanto los momentos magnéticos como los espines S de los iones de A y B, respectivamente, son iguales y tienen direcciones opuestas.

Para estudiar las propiedades térmicas y magnéticas, proponemos un Hamiltoniano con operadores de espín en unidades de \hbar :

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{\langle i,j \rangle_A} J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{\langle i,j \rangle_B} J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_{\langle i,j \rangle_{AB}} J_2 \mathbf{S}_i^A \cdot \mathbf{S}_j^B \\
 & - 2\mu_0 (\mathbf{H}_{\text{ext}} + \mathbf{H}_{\text{An}}) \cdot \sum_{\langle i \rangle_A} \mathbf{S}_i - 2\mu_0 (\mathbf{H}_{\text{ext}} - \mathbf{H}_{\text{An}}) \cdot \sum_{\langle j \rangle_B} \mathbf{S}_j
 \end{aligned} \quad (3.1)$$

donde $J_1 \equiv J_{1A} = J_{1B}$, y J_2 son, respectivamente, las constantes de acoplamiento en la misma subred (intra-red) y entre subredes adyacentes (inter-red); $\langle i, j \rangle_A$, $\langle i, j \rangle_B$ y $\langle i, j \rangle_{AB}$ indican la suma sobre pares de primeros vecinos en la red A, en la red B, y entre las redes A y B, respectivamente; $\mu_0 = \frac{1}{2} g_J \mu_B$, donde g_J es el factor de Landé y μ_B , el magnetón de Bohr.

El primer sumando, que llamamos H_A , describe las interacciones en la subred A; el segundo, las interacciones en la subred B y lo podemos denotar como H_B ; el tercero, las interacciones entre las subredes adyacentes A y B, y lo llamamos H_{AB} ; cada subred contiene N sitios. Por lo tanto, el número de sitios del sistema es $2N$ sitios. El cuarto y el quinto término representan la interacción de Zeeman, donde \mathbf{H}_{ext} es un campo magnético externo aplicado; \mathbf{H}_{An} representa la anisotropía efectiva de campo eléctrico cristalino (CEF), que fuerza a los momentos magnéticos a orientarse en dirección de la magnetización en la subred A y en dirección de la magnetización en la subred B, respectivamente. Estos dos últimos sumandos del Hamiltoniano pueden ser englobados en un término llamado H_C . Entonces, el Hamiltoniano queda expresado como

$$H_k = H_A + H_B + H_{AB} + H_C \quad (3.2)$$

3.1.1. Transformación de Holstein-Primakoff

A través de la transformación de Holstein-Primakoff expresaremos los operadores de espín de la ecuación (3.1) en función de operadores de creación y aniquilación. Así para la subred A tenemos

$$S_{A,l}^+ = \sqrt{2S} f_l(S) a_l \quad (3.3)$$

$$S_{A,l}^- = \sqrt{2S} a_l^\dagger f_l(S) \quad (3.4)$$

$$S_{A,l}^z = S - a_l^\dagger a_l \quad (3.5)$$

$$f_l(S) = \sqrt{1 - \frac{n_l}{2S}} \quad (3.6)$$

donde S es el número cuántico angular; a_l^\dagger y a_l representan, respectivamente, los operadores de creación y aniquilación del átomo en el sitio l en la subred A; n_l es el operador número de partículas $n_l = a_l^\dagger a_l$ en el sitio l de la subred A.

Similarmente, para la subred B tenemos

$$S_{B,m}^+ = \sqrt{2S} f_m(S) b_m \quad (3.7)$$

$$S_{B,m}^- = \sqrt{2S} b_m^\dagger f_m(S) \quad (3.8)$$

$$S_{B,m}^z = -S + b_m^\dagger b_m \quad (3.9)$$

$$f_m(S) = \sqrt{1 - \frac{n_m}{2S}} \quad (3.10)$$

donde b_m^\dagger y b_m son, respectivamente, los operadores de creación y aniquilación de un átomo en el sitio m en la subred B; n_m es el operador número de partículas $n_m = b_m^\dagger b_m$ en el sitio m de la subred B. Dado que la excitación de espín descrito por $b_m^\dagger b_m$ es mucho menor comparado con el espín total $2S$ [56], de modo que, esta transformación es especialmente útil cuando S es grande, pues las raíces cuadradas en la transformación pueden ser expandidas en potencias de S .

3.1.2. Aplicación de la transformación de Holstein-Primakoff

Consideraremos que la dirección de cuantización es el eje z o dirección $(1,0,0)$. Una aproximación *lineal* consiste en tomar apenas el primer término de la expansión en las ecuaciones (3.6), (3.10), válido para tem-

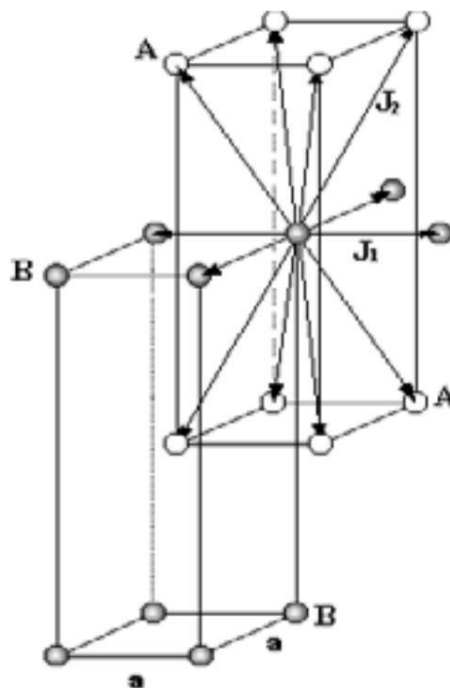


Figura 3.1: Esquema mostrando las subredes magnéticas A y B

peratura bajas; los términos siguientes dan origen a las interacciones entre magnones que no consideramos en este trabajo.

A continuación, hacemos una segunda transformación a través de la transformada de Fourier para expresar los operadores de creación y aniquilación, que dependen de variables atómicas en el espacio real, en función de la variable k en el espacio recíproco.

También llamado espacio de magnones.

$$c_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_l} a_l \quad y \quad (3.11)$$

$$c_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_l} a_l^\dagger \quad (3.12)$$

$$d_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_m} b_m \quad (3.13)$$

$$d_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_m} b_m^\dagger \quad (3.14)$$

Por consiguiente, los operadores de espín de las ecuaciones (3.3), (3.4), (3.5), (3.6), (3.7), (3.8), (3.9) y (3.10) en el espacio k de magnones quedan expresados en la subred A

$$S_{A,l}^+ = \sqrt{\frac{2S'}{N}} \left[\sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_l} c_{\mathbf{k}} + \dots \right] \quad (3.15)$$

$$S_{A,l}^- = \sqrt{\frac{2S'}{N}} \left[\sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_l} c_{\mathbf{k}}^\dagger + \dots \right] \quad (3.16)$$

$$S_{A,l}^z = S - \frac{1}{N} \left[\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}_l} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \dots \right] \quad (3.17)$$

y en la subred B

$$S_{B,m}^+ = \sqrt{\frac{2S'}{N}} \left[\sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_m} d_{\mathbf{k}}^\dagger + \dots \right] \quad (3.18)$$

$$S_{B,m}^- = \sqrt{\frac{2S'}{N}} \left[\sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_m} d_{\mathbf{k}} + \dots \right] \quad (3.19)$$

$$S_{B,m}^z = -S + \frac{1}{N} \left[\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}_m} d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} + \dots \right] \quad (3.20)$$

En el hamiltoniano del sistema, cada espín en cada sitio de la red interactúa con los vecinos más cercanos a través de un vector ρ que conecta el átomo j con los primeros vecinos mas cercanos [48].

Ahora remplazamos todas estas transformaciones en cada sumando del hamiltoniano del sistema, ecuación (3.2). Entonces, para H_A tenemos

$$H_A = -J \sum_{j\rho} S_j \cdot S_{j+\rho} \quad (3.21)$$

$$= -J \sum_{j\rho} \left[S_j^x S_{j+\rho}^x + S_j^y S_{j+\rho}^y + S_j^z S_{j+\rho}^z \right] \quad (3.22)$$

$$= -J \sum_{j\rho} \left[\frac{1}{2} (S_j^+ S_{j+\rho}^- + S_j^- S_{j+\rho}^+) + S_j^z S_{j+\rho}^z \right] \quad (3.23)$$

donde

$$\frac{1}{2} (S_j^+ S_{j+\rho}^- + S_j^- S_{j+\rho}^+) = S(a_j a_{j+\rho}^\dagger + a_{j+\rho}^\dagger a_j) \quad (3.24)$$

y

$$S_j^z S_{j+\rho}^z = S^2 - S(a_j^\dagger a_j + a_{j+\rho}^\dagger a_{j+\rho}) \quad (3.25)$$

Por lo tanto H_A queda asi

$$H_A = -J \sum_{j,\rho} \left[S^2 - S(a_j^\dagger a_j + a_{j+\rho}^\dagger a_{j+\rho}) + S(a_j a_{j+\rho}^\dagger + a_{j+\rho}^\dagger a_j) \right] \quad (3.26)$$

Luego, tenemos los productos de operadores de creación y aniquilación

$$\sum_{j,\rho} a_j^\dagger a_j = \sum_{j,\rho} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j} c_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}_j} c_{\mathbf{k}'} \quad (3.27)$$

Por principio de invariabilidad translacional

$$N \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \sum_j e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}_j} \quad (3.28)$$

Por lo tanto

$$\sum_{j,\rho} a_j^\dagger a_j = z_1 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad \text{y} \quad \sum_{j,\rho} a_{j+\rho}^\dagger a_{j+\rho} = z_1 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (3.29)$$

$$\sum_{j,\rho} a_j a_{j+\rho}^\dagger = z_1 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \delta_{\mathbf{k}} \quad \text{y} \quad \sum_{j,\rho} a_{j+\rho}^\dagger a_j = z_1 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \delta_{(-\mathbf{k})} \quad (3.30)$$

donde, $z_1 = 4$, son los primeros vecinos más cercanos que se encuentran en el plano A ó B.

Aplicando ley de conmutación

$$\left[c_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}}^\dagger \right] = c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger - c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} = 1 \quad (3.31)$$

$$c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger = c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} - 1 \quad (3.32)$$

por el principio de simetría de inversión espacial en el espacio de magnones

$$\delta_{\mathbf{k}} = \delta_{(-\mathbf{k})} \quad (3.33)$$

y reemplazando las ecuaciones (3.27), (3.28) y (3.30), en (3.26) obtenemos

$$\begin{aligned} H_A &= -J \sum_{j\rho} S_j \cdot S_{j+\rho} \\ &= -J_1 z_1 N S^2 + 2J_1 S z_1 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} (1 - \delta_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Utilizando un procedimiento similar para obtener H_A , se obtiene H_B

$$\begin{aligned} H_B &= - \sum_{\langle i,j \rangle \in B} J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ &= -J \sum_{j\rho} \left[S^2 - S(b_j^{\dagger} b_j + b_{j+\rho}^{\dagger} b_{j+\rho}) + S(b_j b_{j+\rho}^{\dagger} + b_j^{\dagger} b_{j+\rho}) \right] \\ &= -J_1 z_1 N S^2 + 2J_1 S z_1 \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} (1 - \delta_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (3.35)$$

donde se utilizaron las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} \sum_{j,\rho_2} b_{j+\rho_2}^{\dagger} b_{j+\rho_2} &= z_1 \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}}, & \sum_{j,\rho} b_j^{\dagger} b_{j+\rho} &= z_1 \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}}, \\ \sum_{j,\rho} b_j b_{j+\rho}^{\dagger} &= z_1 \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \delta_{(-\mathbf{k})} & \text{y} & \sum_{j,\rho} b_j^{\dagger} b_j &= z_1 \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Aplicando procedimiento similar se obtiene H_{AB}

$$\begin{aligned} H_{AB} &= \sum_{\langle i,j \rangle \in AB} J_2 \mathbf{S}_i^A \cdot \mathbf{S}_j^B \\ &= -J_2 \sum_{j\rho_2} \left[S^2 - S(a_j^{\dagger} a_j + b_{j+\rho_2}^{\dagger} b_{j+\rho_2}) - S(a_j b_{j+\rho_2} + a_j^{\dagger} b_{j+\rho_2}^{\dagger}) \right] \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} &= -J_2 z_2 N S^2 + J_2 z_2 N S \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + J_2 z_2 N S \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} \\ &\quad + J_2 z_2 N S \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} + J_2 z_2 N S \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{aligned} \quad (3.38)$$

donde $z_2 = 8$, son los primeros vecinos más cercanos entre los planos adyacentes A y B.

Utilizando las siguientes relaciones se obtiene

$$\sum_{j,\rho_2} a_j^{\dagger} b_{j+\rho_2} = z_2 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad \text{y} \quad \sum_{j,\rho} a_j b_{j+\rho} = z_2 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}. \quad (3.39)$$

finalmente, llamamos H_C a

$$\begin{aligned}
H_C &= -2\mu_0(\mathbf{H}_{\text{ext}} + \mathbf{H}_A) \cdot \sum_{\langle i \rangle \in A} \mathbf{S}_i - 2\mu_0(\mathbf{H}_{\text{ext}} - \mathbf{H}_A) \cdot \sum_{\langle j \rangle \in B} \mathbf{S}_j \\
&= -2\mu_0(H_{\text{ext}} + H_A) \sum_{\langle i \rangle \in A} (S - a_i^\dagger a_i) - 2\mu_0(H_{\text{ext}} - H_A) \sum_{\langle j \rangle \in B} (-S + b_j^\dagger b_j) \\
&= -4\mu_0 H_A N + 2\mu_0(H_{\text{ext}} + H_A) \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} - 2\mu_0(H_{\text{ext}} - H_A) \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \quad (3.40)
\end{aligned}$$

Remplazando las expresiones obtenidas en las ecuaciones (3.34), (3.35), (3.38), (3.40) y omitiendo los términos constantes donde no actúan los operadores de creación y aniquilación, en la ecuación (3.2) se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
H_k &= \left[z_2 J_2 S + 2z_1 S J_1 \sum_{\mathbf{k}} (1 - \delta_{\mathbf{k}}^1) + 2\mu_0 H_A \right] \left[c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \right] + 2\mu_0 H_{\text{ext}} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} - d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}) \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k}} z_2 J_2 S \delta_{\mathbf{k}}^2 (c_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} z_2 J_2 S \delta_{\mathbf{k}}^2 (c_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}) \quad (3.41)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left[J_2 S z_2 + 2z_1 S J_1 \sum_{\mathbf{k}} (1 - \delta_{\mathbf{k}}^1) + 2\mu_0 H_A \right] \left[c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \right] \\
&\quad + 2\mu_0 H_{\text{ext}} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} - d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} z_2 J_2 S \delta_{\mathbf{k}}^2 (c_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}) \quad (3.42)
\end{aligned}$$

3.2. Diagonalización del hamiltoniano con el método de Bogoliubov

La ecuación (3.42) contiene términos cuadráticos, lo cual significa que no se conserva el número de partículas; por ello diagonalizaremos ese hamiltoniano haciendo uso de otra transformación, la transformación de Bogoliubov, introduciendo *nuevos* operadores de creación y aniquilación con momento \mathbf{k} : $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$, $\alpha_{\mathbf{k}}$, $\beta_{\mathbf{k}}^\dagger$, y $\beta_{\mathbf{k}}$, de modo que se cumplan las siguientes propiedades [48];

$$\left[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \right] = 1, \quad \left[\beta_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \right] = 1 \quad \text{y} \quad \left[\alpha_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}} \right] = 0 \quad (3.43)$$

Esta representa una transformación canónica ya que preservan las relaciones de conmutación. Entonces, tenemos la transformada directa

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \mu_K c_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^\dagger \quad \text{y} \quad \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger = \mu_K c_{\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \quad (3.44)$$

$$\beta_{\mathbf{k}} = \mu_K d_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \quad \text{y} \quad \beta_{\mathbf{k}}^\dagger = \mu_K d_{\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \quad (3.45)$$

y la transformada inversa

$$c_{\mathbf{k}} = \mu_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad \text{y} \quad c_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \mu_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \nu_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}} \quad (3.46)$$

$$d_{\mathbf{k}} = \mu_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad \text{y} \quad d_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \mu_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \nu_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} \quad (3.47)$$

También, debemos indicar que, históricamente, la teoría de las ondas de espín en los antiferromagnéticos fue desarrollada en los trabajos de Bogoliúbov y Tiablijev [51, 52].

Por la condición de diagonalización se tiene la siguiente ecuación

$$[\alpha_{\mathbf{k}}, H_{\mathbf{k}}] = \lambda \alpha_{\mathbf{k}} \quad (3.48)$$

Reemplazando valores de $\alpha_{\mathbf{k}}$ y $H_{\mathbf{k}}$ en ecuación (3.48) se obtiene un sistema de dos ecuaciones en términos de $c_{\mathbf{k}}$ y $d_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ y como operan en espacios diferentes, sus coeficientes deben ser **iguales a cero**

$$\left(A_{\mathbf{k}}\mu_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} + 2\mu_0 H_{\text{ext}}\mu_{\mathbf{k}} - \mu_{\mathbf{k}}\lambda \right) c_{\mathbf{k}} \quad (3.49)$$

$$\left(A_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}\mu_{\mathbf{k}} - 2\mu_0 H_{\text{ext}}\nu_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}}\lambda \right) d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (3.50)$$

$$A_{\mathbf{k}}\mu_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} + 2\mu_0 H_{\text{ext}}\mu_{\mathbf{k}} - \mu_{\mathbf{k}}\lambda = 0 \quad (3.51)$$

$$A_{\mathbf{k}}\nu_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}\mu_{\mathbf{k}} - 2\mu_0 H_{\text{ext}}\nu_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}}\lambda = 0 \quad (3.52)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones de los coeficientes se obtiene

$$\lambda = \sqrt{A_{\mathbf{k}}^2 - B_{\mathbf{k}}^2} + 2\mu_0 H_{\text{ext}} \quad (3.53)$$

Por definición, λ es la frecuencia y se toma el signo positivo por razones físicas, es decir, las excitaciones deben ser siempre positivas incluso para $H_{\text{ext}} = 0$ [49]. Por lo tanto, la relación de dispersión general es

$$w_{\mathbf{k}}^{\pm} = w_{\mathbf{k}} \pm 2\mu_0 H_{\text{ext}} \quad (3.54)$$

donde $w_{\mathbf{k}}$ está definida por

$$w_{\mathbf{k}} = \sqrt{A_{\mathbf{k}}^2 - B_{\mathbf{k}}^2} \quad (3.55)$$

con

$$A_{\mathbf{k}} = z_1 J_1 S (1 - \gamma_{\mathbf{k}}^{(1)}) + z_2 J_2 S + 2\mu_0 H_A \quad (3.56)$$

y

$$B_{\mathbf{k}} = z_2 J_2 S \gamma_{\mathbf{k}}^{(2)} \quad (3.57)$$

Estos vectores son

$$\delta_{\mathbf{k}}^{(1)} = \begin{cases} \pm & a\hat{x} \\ & \pm a\hat{y} \end{cases} \quad \text{y} \quad \delta_{\mathbf{k}}^{(2)} = \begin{cases} \pm & (\frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{c}{2}\hat{z}) \\ \pm & (-\frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{c}{2}\hat{z}) \\ \pm & (\frac{a}{2}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{c}{2}\hat{z}) \\ \pm & (\frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} - \frac{c}{2}\hat{z}) \end{cases} \quad (3.58)$$

donde $\delta_{\mathbf{k}}^{(1)}$ recorre los $z_1 = 4$ primeros vecinos más cercanos que se encuentran en el plano A ó B; y $\delta_{\mathbf{k}}^{(2)}$ recorre los $z_2 = 8$ primeros vecinos más cercanos entre los planos adyacentes A y B. A temperaturas bajas, los estados que más contribuyen a las propiedades físicas son las de energía más bajas; en las cercanías de $k \simeq 0$, es justificable expandir en términos de cosenos las ecuaciones y mantener el término de segundo orden en k en dicha expansión

$$\gamma_{\mathbf{k}}^1 = \frac{1}{z_1} \sum_{\delta_1} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_1} k \simeq \frac{1}{2} \left[2 - \frac{1}{2} a^2 (k_x^2 + k_y^2) \right] \quad (3.59)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{z_2} \sum_{\delta_2} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_2} k \simeq \frac{1}{4} \left[4 - \frac{1}{2} a^2 (k_x^2 + k_y^2) - \frac{1}{2} c^2 k_z^2 \right] \quad (3.60)$$

Cuando $\mathbf{k}=0$ la relación de dispersión es

$$w_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Delta \pm 2\mu_0 H_{\text{ext}} \quad (3.61)$$

con

$$\Delta \simeq \sqrt{32J_2 S \mu_0 H_A + (2\mu_0 H_A)^2} \quad (3.62)$$

evaluando $A_{\mathbf{k}}$ y $B_{\mathbf{k}}$ considerando aproximaciones coseno cuando el argumento es pequeño, es decir, solamente manteniendo el término de segundo orden, tenemos que

$$A_{\mathbf{k}} = J_1 S a^2 (k_x^2 + k_y^2) + 8J_2 S + 2\mu_0 H_A \quad (3.63)$$

$$B_{\mathbf{k}} = J_2 S a^2 (k_x^2 + k_y^2) + 8J_2 S - J_2 S c^2 k_z^2 \quad (3.64)$$

Finalmente, en este caso, la relación de dispersión es

$$w_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + c_1 a^2 (k_x^2 + k_y^2) + c_2 c^2 k_z^2} \quad (3.65)$$

donde

$$c_1 = 16(J_1 + J_2)J_2 S^2 + 2J_1 S(2\mu_0 H_A) \quad (3.66)$$

y

$$c_2 = 16J_2^2 S^2 \quad (3.67)$$

3.3. Densidad de estados sin campo magnético externo

La densidad de estados sin campo magnético para cada banda está definida por

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_\varepsilon}{|\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon|} \quad (3.68)$$

donde $\varepsilon = w_{\mathbf{k}}$; V es el volumen del sistema; $dS_{\varepsilon_{\pm}}$, elemento de área en el espacio \mathbf{k} de una superficie de energía constante igual a ε . De la ecuación. (3.65), relación de dispersión, encontramos

$$|\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon| = \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{c_1(a^2 c_1 - c^2 c_2)a^2(k_x^2 + k_y^2) + c^2 c_2(\varepsilon^2 - \Delta^2)} \quad (3.69)$$

Proyectando la superficie de energía constante al plano $k_x k_y$, el elemento de superficie de energía constante se puede escribir como [50]:

$$dS = \sqrt{1 + \left(\frac{\partial k_z}{\partial k_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial k_z}{\partial k_y}\right)^2} dx dy \quad (3.70)$$

Escribiendo k_z de la ecuación (3.65) en función de k_x y k_y obtenemos:

$$k_z = \frac{1}{c\sqrt{c_2}} \left[\varepsilon^2 - \Delta^2 - c_1 a^2 (k_x^2 + k_y^2) \right]^{1/2} \quad (3.71)$$

$$dS_\varepsilon = \frac{\left[c^2 c_2 (\varepsilon^2 - \Delta^2) + c_1 (a^2 c_1 - c^2 c_2) a^2 (k_x^2 + k_y^2) \right]^{1/2}}{c\sqrt{c_2} \left[(\varepsilon^2 - \Delta^2) + c_1 a^2 (k_x^2 + k_y^2) \right]^{1/2}} dk_x dk_y \quad (3.72)$$

Entonces

$$\int \frac{dS_\varepsilon}{|\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon|} = \frac{4\pi\varepsilon}{c\sqrt{c_2}} \int_0^\Delta \frac{k dk}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - c_1 a^2 k^2}} \quad (3.73)$$

donde

$$|\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (3.74)$$

$$\Lambda = \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}}{a\sqrt{c_1}} \quad (3.75)$$

La superficie de energía constante tiene la forma de un elipsoide con los que queda expresado la densidad de estados

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2 c_1 \sqrt{c_2} a^2 c} \varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2} \quad (3.76)$$

donde $\varepsilon = w_{\mathbf{k}}$ está dado por la ecuación, V es volumen del sistema, N número de átomos de tierra rara en una subred, $v_c = \frac{a^2 c}{2}$ volumen de célula v es el número de moles, N_a es el número de avogadro. Expresamos los parámetros c_1 , c_2 y ε energía en términos de unidades de temperatura absoluta; combinando k_B con N_a $R=8.3134 \frac{\text{J}}{\text{K-mol}}$, la constante universal de los gases.

Finalmente, escribimos la densidad de estados para cada banda en ausencia de campo magnético aplicado como $vD(\varepsilon)$, donde

$$D(\varepsilon) = \frac{R}{4\pi^2 c_1 \sqrt{c_2}} \varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2} \quad (3.77)$$

Observamos que c_1 y c_2 son factores multiplicativos. El modelo introduce tres constantes J_1 , J_2 y H_A y Δ se obtiene experimentalmente.

3.4. Densidad de estados con un campo magnético externo

La densidad de estados en presencia de un campo magnético externo es

$$vD^\pm(\varepsilon_\pm) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_{\varepsilon_\pm}}{|\nabla_{\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}}^\pm|} \quad (3.78)$$

donde

$\varepsilon_\pm = w_{\mathbf{k}}^\pm = w_{\mathbf{k}} \pm 2\mu_0 H_{ext}$; V es el volumen del sistema; dS_{ε_\pm} , elemento de área en el espacio k de una superficie de energía constante igual a ε_\pm

$$D^\pm(\varepsilon_\pm) = \frac{R}{4(\pi)^3 c_1 \sqrt{c_2}} (\varepsilon_\pm \pm 2\mu_0 H_{ext}) \left\{ (\varepsilon_\pm \pm 2\mu_0 H_{ext})^2 - \Delta^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.79)$$

El número de estados de magnones, $D^\pm(\varepsilon_\pm)$, por unidad de frecuencia varía a todo el intervalo permitido de k ; es decir, la primera zona de Brillouin; a temperaturas suficientemente bajas. Por lo tanto, la integral puede extenderse entre 0 e ∞ porque $\langle n_\varepsilon \rangle \rightarrow 0$ exponencialmente cuando $w \rightarrow \infty$

3.5. Energía interna sin campo magnético externo

La energía interna de las excitaciones de ondas de espín, en equilibrio térmico, dado por

$$E = E_0 + 2 \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = E_0 + 2 \int_{\Delta}^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) \langle n_\varepsilon \rangle d\varepsilon \quad (3.80)$$

donde E_0 es una constante que no depende de la temperatura, $\langle n_\varepsilon \rangle$ es la función de distribución de Bose-Einstein

$$\langle n_\varepsilon \rangle = \frac{1}{e^{\varepsilon\beta} - 1} \quad (3.81)$$

Sustituyendo la ecuación (3.77) en (3.80) tenemos

$$E = E_0 + \frac{vR}{2\pi^2 c_1 \sqrt{c_2}} \int_{\Delta}^{\infty} \varepsilon^2 \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2} \langle n_\varepsilon \rangle d\varepsilon \quad (3.82)$$

3.6. Energía interna con campo magnético externo

La energía interna de las excitaciones de ondas de espín en equilibrio térmico es

$$E = E_0 + v \int_{\Delta+2\mu_0 H_{ext}}^{\infty} \varepsilon_+ D(\varepsilon_+ - 2\mu_0 H_{ext}) \langle n_{\varepsilon_+} \rangle d\varepsilon_+ \\ + v \int_{\Delta-2\mu_0 H_{ext}}^{\infty} \varepsilon_- D(\varepsilon_- + 2\mu_0 H_{ext}) \langle n_{\varepsilon_-} \rangle d\varepsilon_- \quad (3.83)$$

donde E_0 es independiente de la temperatura.

Capítulo 4

Cálculos analíticos del calor específico

La contribución magnética al calor específico es debido a la interacción de momentos magnéticos con diferentes niveles de energía con el campo externo. A consecuencia de esa interacción, la estructura de los niveles energéticos es modificada y la población de cada nivel viene dada por la estadística de Bose-Einstein. Solamente la ausencia de vibración térmica permite encontrar la contribución magnética de las ondas de espín al calor específico magnético. La transición de ordenamiento magnético produce singularidades que se observan en un gráfico de calor específico; es decir, ésta es una herramienta formidable para identificar las transiciones de fase, incluyendo la transición a la fase superconductora.

4.1. Calor específico sin campo magnético externo

El calor específico molar C_m a volumen constante está definido por

$$C_m = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v \quad (4.1)$$

donde v es el número de moles y E , la energía interna. En función de la temperatura y con campo magnético externo nulo: el calor específico viene dado por

$$C_{m(T, H_{\text{ext}}=0)} = \frac{1}{T^2} \int_{\Delta}^{\infty} \varepsilon^2 D(\varepsilon) \langle n_{\varepsilon} \rangle^2 e^{\beta \varepsilon} d\varepsilon \quad (4.2)$$

Considerando la expresión (3.81), tenemos que $\frac{1}{(e^{\varepsilon\beta}-1)^2}$ se puede escribir de la siguiente forma

$$\frac{1}{(e^{\varepsilon\beta}-1)^2} = \frac{e^{-2\varepsilon\beta}}{(1-e^{-\varepsilon\beta})^2} \quad (4.3)$$

usando la relación

$$\frac{1}{(1-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)x^n \quad (4.4)$$

obtenemos

$$\frac{1}{(e^{\varepsilon\beta}-1)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)e^{-(n+2)\beta\varepsilon} \quad (4.5)$$

sustituyendo la ecuación (4.5) en (4.2) tenemos

$$C_{m(T, H_{\text{ext}}=0)} = \frac{1}{T^2} \sum_{n=0}^{\infty} n \int_{\Delta}^{\infty} \varepsilon^2 D(\varepsilon) e^{-n\beta\varepsilon} d\varepsilon \quad (4.6)$$

Ahora hacemos la sustitución de la densidad (3.77), obteniendo

$$C_{m(T, H_{\text{ext}}=0)} = \frac{R}{2\pi^2 c_1 \sqrt{c_2}} \frac{1}{T^2} \sum_{x=1}^{\infty} I_n \quad (4.7)$$

con

$$I_n = n \int_{\Delta}^{\infty} \varepsilon^3 [\varepsilon^2 - \Delta^2]^{1/2} e^{-n\beta\varepsilon} d\varepsilon \quad (4.8)$$

Haciendo el cambio de variable

$$\varepsilon = \Delta \cosh(t), \quad d\varepsilon = \Delta \sinh(t) \quad \text{y} \quad \frac{\varepsilon^2}{\Delta^2} - 1 = \sinh^2(t) \quad (4.9)$$

I_n queda así

$$\begin{aligned} I_n &= n\Delta^5 \int_0^{\infty} \left[\sinh^2(t) \cosh^3(t) \right] e^{-n\frac{\Delta}{T} \cosh(t)} dt \\ &= n\Delta^5 \int_0^{\infty} \left[\cosh^5(t) - \cosh^3(t) \right] e^{-n\frac{\Delta}{T} \cosh(t)} dt \\ &= n\frac{\Delta^5}{16} \int_0^{\infty} \left[\cosh(5t) + \cosh(3t) - 2\cosh(t) \right] e^{-n\frac{\Delta}{T} \cosh(t)} dt \\ &= n\frac{\Delta^5}{16} \left[K_5\left(n\frac{\Delta}{T}\right) + K_3\left(n\frac{\Delta}{T}\right) - 2K_1\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

donde

$$K_m(x) = \int_0^{\infty} \cosh(mt) e^{-\cosh(t)} dt \quad (4.11)$$

es la función modificada de Bessel de segunda clase con $x = n\frac{\Delta}{T}$. También podemos usar la relación de recurrencia

$$K_{m+1}(x) = K_{m-1}(x) + \frac{2m}{x} K_{m+1}(x) \quad (4.12)$$

Entonces tenemos

$$K_5(x) + K_3(x) - 2K_1(x) = \frac{8}{x} [K_2(x) + K_4(x)] \quad (4.13)$$

Luego

$$I_n = \frac{1}{2} \Delta^4 T \left[K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) + K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \quad (4.14)$$

Finalmente el calor específico queda determinado por

$$C_{m(T, H_{\text{ext}}=0)} = \frac{R}{4\pi^2 c_1 \sqrt{c_2}} \frac{\Delta^4}{T^4} \sum_{n=1}^{\infty} \left[K_3\left(n\frac{\Delta}{T}\right) + K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \quad (4.15)$$

Para altas temperaturas tenemos que $T \gg \Delta$, entonces

$$K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) = \frac{1}{2} \left(\frac{2T}{n\Delta} \right)^2 \quad (4.16)$$

$$K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) = 3 \left(\frac{2T}{n\Delta} \right)^4 \quad (4.17)$$

el término dominante

$$C_{m(T, H_{\text{ext}}=0)} = \frac{R\pi^2}{15c_1 \sqrt{c_2}} T^3 \quad (4.18)$$

Usamos

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90} \quad (4.19)$$

Para temperaturas bajas tenemos que $T \ll \Delta$; así, para estas condiciones la función de Bessel se expresa como

$$K_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-x}}{x^{1/2}} \left[1 + O\left(\frac{1}{x}\right) \right] \quad (4.20)$$

Entonces considerando sólo el primer término de la sumatoria $n = 1$, el calor específico se puede escribir como

$$C_m(T, H_{ext}=0) = \frac{R}{(2\pi)^3 c_1 \sqrt{c_2}} \frac{\Delta^{\frac{7}{2}}}{T^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{\Delta}{T}} \left[1 + O\left(\frac{1}{\Delta}\right) \right] \quad (4.21)$$

4.2. Cálculo del calor específico $C_m(T, H)$ con campo magnético H_{ext}

Aquí hacemos el mismo enfoque de la sección anterior, pero considerando el campo magnético externo y algunas modificaciones en algunos términos.

El calor específico en función de temperatura y campo magnético externo se puede escribir como

$$C_m(T, H_{ext}) = \frac{1}{k_B T^2} \left\{ \int_{\Delta+2\mu_0 H_0}^{\infty} \frac{\varepsilon_+^2 D(\varepsilon_+ - 2\mu_0 H_{ext}) e^{\beta \varepsilon_+}}{(e^{\beta \varepsilon_+} - 1)^2} d\varepsilon_+ + \frac{\varepsilon_-^2 D(\varepsilon_- + 2\mu_0 H_{ext}) e^{\beta \varepsilon_-}}{(e^{\beta \varepsilon_-} - 1)^2} d\varepsilon_- \right\} \quad (4.22)$$

Haciendo las mismas aproximaciones que para 4.5 el caso sin campo magnético, el calor específico expresamos como

$$C_m(T, H_{ext}) = \frac{\phi}{k_B T^2} \sum_{n=1}^{\infty} n [I_n + J_n] \quad (4.23)$$

con

$$\phi I_n = \int_{\Delta+2\mu_0 H_0}^{\infty} \varepsilon_+^2 D(\varepsilon_+ - 2\mu_0 H_{ext}) e^{n\beta \varepsilon_+} d\varepsilon_+ \quad (4.24)$$

$$\phi J_n = \int_{\Delta-2\mu_0 H_0}^{\infty} \varepsilon_-^2 D(\varepsilon_- + 2\mu_0 H_{ext}) e^{-n\beta \varepsilon_-} d\varepsilon_- \quad (4.25)$$

donde

$$\phi = \frac{R}{4\pi^2 c_1 \sqrt{c_2}} \quad (4.26)$$

sustituyendo la densidad de estados, tenemos

$$I_n = \int_{\Delta+2\mu_0 H_0}^{\infty} \varepsilon_+^2 (\varepsilon_+ - 2\mu_0 H_{ext}) \left\{ (\varepsilon_+ - 2\mu_0 H_{ext})^2 - \Delta^2 \right\}^{\frac{1}{2}} e^{-n\beta \varepsilon_+} d\varepsilon_+ \quad (4.27)$$

haciendo cambio de variables se tiene $u = \varepsilon_+ - 2\mu_0 H_{ext}$

$$I_n = e^{-n\beta(2\mu_0 H_{ext})} \left\{ \int_{\Delta}^{\infty} u^3 (u^2 \Delta^2)^{\frac{1}{2}} e^{-n\beta u} du + 2(2\mu_0 H_{ext}) \int_{\Delta}^{\infty} u^2 (u^2 - \Delta^2)^{\frac{1}{2}} e^{-n\beta u} du + (2\mu_0 H_{ext})^2 \int_{\Delta}^{\infty} u (u^2 - \Delta^2)^{\frac{1}{2}} e^{-n\beta u} du \right\} \quad (4.28)$$

haciendo un nuevo cambio de variable $u = \Delta \cosh(t)$ se tiene

$$I_n = e^{-n\beta(2\mu_0 H_{ext})} \left\{ \frac{\Delta^5}{16} \int_0^{\infty} [\cosh(5t) + \cosh(3t) - 2\cosh(t)] e^{-n\frac{\Delta}{T} \cosh(t)} dt + \frac{\Delta^4}{4} (2\mu_0 H_{ext}) \int_0^{\infty} [\cosh(4t) - 1] e^{-n\frac{\Delta}{T} \cosh(t)} dt + \frac{\Delta^3}{4} (2\mu_0 H_{ext})^2 \int_0^{\infty} [\cosh(3t) - \cosh(t)] e^{-n\frac{\Delta}{T} \cosh(t)} dt \right\} \quad (4.29)$$

$$I_n = e^{-n\beta(2\mu_0 H_{ext})} \left\{ \frac{\Delta^5}{16} \left[K_5\left(n\frac{\Delta}{T}\right) + K_3\left(n\frac{\Delta}{T}\right) - 2K_1\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] + \frac{\Delta^4}{4} (2\mu_0 H_{ext}) \int_0^{\infty} \left[K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) - K_0\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] + \frac{\Delta^3}{4} (2\mu_0 H_{ext})^2 \left[K_3\left(n\frac{\Delta}{T}\right) - 2K_1\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \right\} \quad (4.30)$$

donde $K_n\left(n\frac{\Delta}{T}\right)$ es una función modificada de Bessel de segunda clase; definida en la ecuación 4.10. Usando la relación de recurrencia obtenemos

$$I_n = e^{-n\beta(2\mu_0 H_{ext})} \left\{ \frac{\Delta^4 T}{2n} \left[K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) + K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] + \frac{\Delta^4}{4} (2\mu_0 H_{ext}) \left[K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) - K_0\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] + \frac{\Delta^2 T}{n} (2\mu_0 H_{ext})^2 \left[K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \right\} \quad (4.31)$$

Análogamente

$$J_n = e^{n\beta(2\mu_0 H_{ext})} \left\{ \frac{\Delta^4 T}{2n} \left[K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) + K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] - \frac{\Delta^4}{4} (2\mu_0 H_{ext}) \left[K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) - K_0\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] + \frac{\Delta^2 T}{n} (2\mu_0 H_{ext})^2 \left[K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \right\} \quad (4.32)$$

reemplazando las ecuaciones 4.31, 4.32, en la ecuación 4.22, tenemos.

$$C_m(T, H_{ext}) = e^{n\beta(2\mu_0 H_{ext})} \left\{ \frac{\Delta^4 T}{2n} \left[K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) + K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] - \frac{\Delta^4}{4} (2\mu_0 H_0) \left[K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) - K_0\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] + \frac{\Delta^2 T}{n} (2\mu_0 H_0)^2 \left[K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \right\} \quad (4.33)$$

El calor específico queda expresado como

$$C_m(T, H_{ext}) = \frac{R}{4\pi^2 c_1 \sqrt{c_2}} \frac{\Delta^4}{T^4} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ T \left[K_2\left(n\frac{\Delta}{T}\right) + K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \cosh \left[n\frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right] - \frac{n}{2} (2\mu_0 H_{ext}) \left[K_4\left(n\frac{\Delta}{T}\right) - K_0\left(n\frac{\Delta}{T}\right) \right] \sinh \left[n\frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right] + 2 \left(\frac{2\mu_0 H_{ext}}{\Delta} \right)^2 T K_2 \cosh \left[n\frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right] \right\} \quad (4.34)$$

donde $K_v(z)$ es una función modificada de Bessel de segunda clase; cuando la temperatura tiende a cero se tiene la expresión

$$K_v(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ 1 + \frac{(4v^2 - 1^2)}{1!8z} + \frac{(4v^2 - 1^2)(4v^2 - 3^2)}{2!(8z)^2} + \dots \right\} \quad (4.35)$$

tomando los dos primeros términos de la función anterior se obtiene la siguiente expresión

$$K_v(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ 1 + \frac{(4v^2 - 1^2)}{1!8z} + \dots \right\} \quad (4.36)$$

escribiendo los valores de v tenemos las siguientes relaciones

$$K_4(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ 1 + \frac{63}{8z} + \dots \right\} \quad (4.37)$$

$$K_2(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ 1 + \frac{15}{8z} + \dots \right\} \quad (4.38)$$

$$K_0(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ 1 - \frac{1}{8z} + \dots \right\} \quad (4.39)$$

sumando las ecuaciones 4.37+ 4.38 y 4.37-4.39 tenemos las siguientes relaciones

$$K_4(z) + K_2(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ 2 + \frac{78}{8z} + \dots \right\} \quad (4.40)$$

$$K_4(z) - K_0(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ \frac{8}{z} + \dots \right\} \quad (4.41)$$

sabemos que

$$\cosh \left(n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right) = \frac{e^{n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T}} + e^{-n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T}}}{2} \quad (4.42)$$

$$\sinh \left(n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right) = \frac{e^{n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T}} - e^{-n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T}}}{2} \quad (4.43)$$

cuando $T \rightarrow 0$

$$\cosh \left(n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right) = e^{n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T}} \quad (4.44)$$

$$\sinh \left(n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right) = e^{n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T}} \quad (4.45)$$

$$z = n \frac{\Delta}{T}$$

reemplazando las relaciones 4.40, 4.41, 4.44, 4.45 en la ecuación 4.34 el calor específico es

$$\begin{aligned} C_m(T, H_{ext}) = & \frac{R}{4\pi^2 c_1 \sqrt{c_2}} \frac{\Delta^4}{T^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ T \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ 2 + \frac{78}{8z} + \dots \right\} \right] \cosh \left[n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right] \right. \\ & - \frac{n}{2} (2\mu_0 H_{ext}) \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ \frac{8}{z} + \dots \right\} \right] \sinh \left[n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right] \\ & \left. + 2 \left(\frac{2\mu_0 H_{ext}}{\Delta} \right)^2 T \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{e^{-z}}{z^{\frac{1}{2}}} \right) \left\{ 1 + \frac{15}{8z} + \dots \right\} \cosh \left[n \frac{2\mu_0 H_{ext}}{T} \right] \right\} \quad (4.46) \end{aligned}$$

cuando $T \rightarrow 0$ entonces $T^2 \rightarrow 0$ finalmente el $C_m(T, H_{ext})$ queda expresado como

$$C_m(T, H_{ext}) \simeq \frac{R\Delta^{\frac{7}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{3}{2}} D_a^3 T^{\frac{1}{2}}} e^{\left(\frac{\varepsilon}{T} \right)} \left[1 - 2 \left(\frac{\varepsilon}{\Delta} \right) + \left(\frac{\varepsilon}{\Delta} \right)^2 + \dots \right] \quad (4.47)$$

donde $\varepsilon = g\mu_0 \frac{H \cos(\theta)}{k_B}$, siendo θ el ángulo entre el eje fácil y el campo magnético externo.

Cuando se aplica un campo magnético externo a lo largo del eje fácil, en ambos modos magnéticos, conmensurable e inconmensurable, se observa una cascada de transformaciones metamagnéticas, cada una con diferentes modos magnéticos con distinto vector de propagación y distinto momento magnético, cuyas características se reflejan en las medidas de las propiedades termodinámicas [26,37–40]. A bajas temperaturas, las propiedades magnéticas son gobernadas por la excitación de cuasipartículas de espines, magnones, hecho que es estudiado con la teoría de ondas de espín. En este trabajo proponemos un modelo para investigar la contribución del calor específico a través del diagrama de fases. La aplicación de un campo magnético externo da como resultado el surgimiento de transiciones de fase, llamada metamagnética; particularmente fueron observados en $HoNi_2B_2C$, cuatro estados metamagnéticos:

- a) estado fundamental ($\uparrow\downarrow$),
- b) primer estado metamagnético ($\uparrow\uparrow\downarrow$),
- c) segundo estado metamagnético ($\uparrow\uparrow\rightarrow$),
- d) estado paramagnético saturado (\uparrow).

Las flechas $\uparrow, \downarrow, \rightarrow$ representan momentos locales alineados a lo largo del eje (1,1,0) que son, respectivamente, paralelo, antiparalelo y perpendicular a la dirección del campo aplicado.

Capítulo 5

Resultados: Aplicación e interpretaciones físicas

Aplicando las aproximaciones de ondas de espín a los compuestos borocarburos de níquel RNi_2B_2C ($R = Gd, Ho, Er$) que presentan una amplia variedad de estructuras magnéticas, en presencia de campo magnético externo, se determina los rangos de temperatura y del campo magnético donde es aplicable la teoría de onda de espín.

5.1. Datos experimentales

En [60], se muestran los gráficos experimentales etiquetado como; Fig 2, Fig 5, Fig 7, correspondiente a los compuestos $GdNi_2B_2C$, $ErNi_2B_2C$, $HoNi_2B_2C$ respectivamente, y utilizando un aplicativo de "Web Plot Digitizer" se determinan los valores experimentales, es decir, una "tabla" de medidas de calor específico y de temperatura, con esta "tabla" se plotea con "GNUPLOT" luego se ajustan estas medidas experimentales con la ecuación (4.47), los resultados para cada caso se muestran a continuación.

5.2. $GdNi_2B_2C$

A temperaturas $T < 3.5K$, este compuesto presenta una estructura magnética antiferromagnética con un gap (Δ) y constante de rigidez (D) como se muestra en la tabla(5.1). En la contribución de los magnones

H(kOe)	Δ (K)	D(K)
0	2.9	5.5
2.5	4.45	11.24
10	9.29	39.87
20	12.41	2.28
30	18.61	5.82

Tabla 5.1: $GdNi_2B_2C$; H, Δ , D

al calor específico en la ecuación (4.47), el resultado obtenido se aproxima bien al resultado experimental, ver la figura (5.1).

Cuando el campo magnético es $H = 0kOe$ la disposición de los momentos magnéticos de los iones de

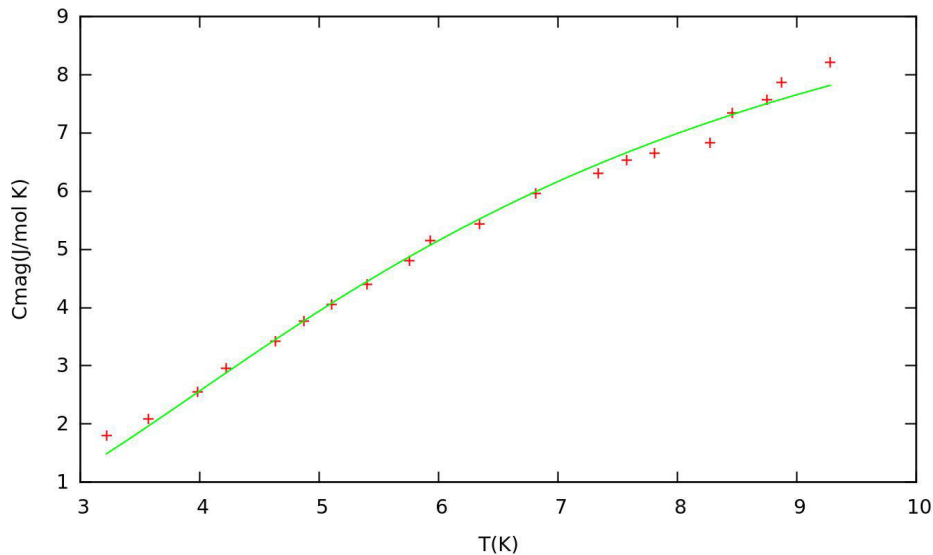


Figura 5.1: C_{mag} (J/molK) de $GdNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 0kOe$, la línea continua corresponde a resultado teórico, y las \times corresponden a los valores experimentales

tierras raras, en el cristal está constituido por dos subredes A y B superpuestas una en la otra, de modo que todos los vecinos próximos de cada ión de A son iones de B y viceversa. Tanto los momentos magnéticos así como los espines S de los iones de A y B, son iguales y tienen direcciones opuestas. De modo que cuando hay una excitación, el cambio de sentido de un espín en sentido opuesto se genera de espín. En este trabajo de tesis consideramos la medida macroscópica de calor específico en función de la temperatura con un campo magnético externo. En los gráficos del $GdNi_2B_2C$ se observa para que campos magnéticos:

$H = 0kOe$, $H = 2kOe$, $H = 10kOe$, hasta temperatura de 9K, la línea continua que describe el modelo, y los \times que representa la curva experimental; podemos decir que hay una concordancia entre los valores: teórico y experimental. Cuando el campo magnético es $H = 20kOe$, hay un discordancia entre el valor experimental y teórico, como se observa en el gráfico; podemos decir, que conforme aumenta el campo magnético externo las ondas de espín se destruyen, y toman preponderancia la temperatura y campo magnético. En el gráfico

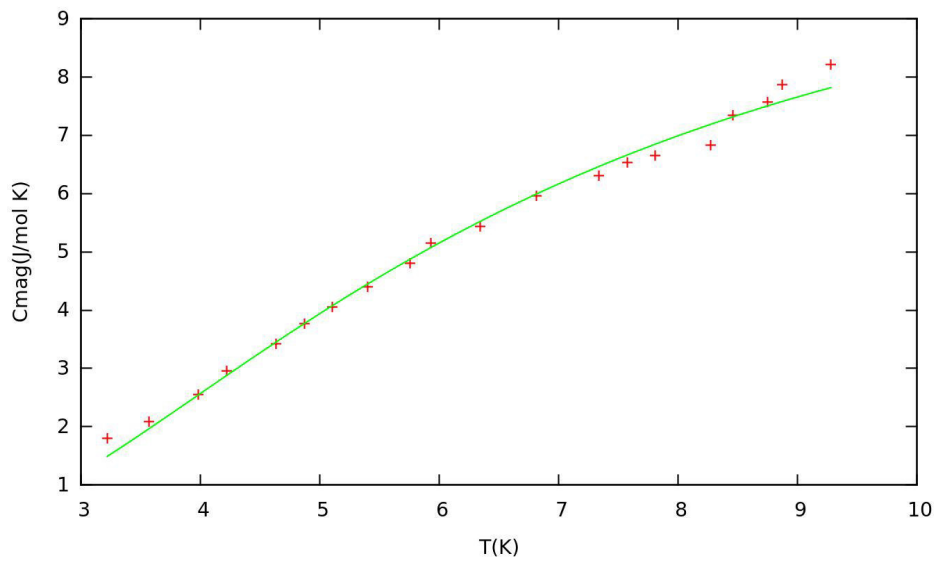


Figura 5.2: $C_{mag}(J/molK)$ de $GdNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 2kOe$

5.4, cuando $H = 20kOe$, se observa que la línea teórica y los \times que representan valores experimentales no coinciden. Esto se puede interpretar, que cuando en el campo $H = 20kOe$ hay destrucción de ondas de espín, comienza la interacción entre magnones. La aproximación de ondas de espín es válida cuando se trata como un gas de magnones libres.

5.3. $ErNi_2B_2C$

Para describir el comportamiento magnético del compuesto $ErNi_2B_2C$ podemos separar en dos intervalos de temperatura que son: $T < (T_{wf} = 2.2K)$ y $T_{wf} < T < T_N$, en el punto $T_{wf} = 2.2K$ este compuesto presenta una transformación de fase antiferromagnética. El calor específico modelado por 4.47, no describe

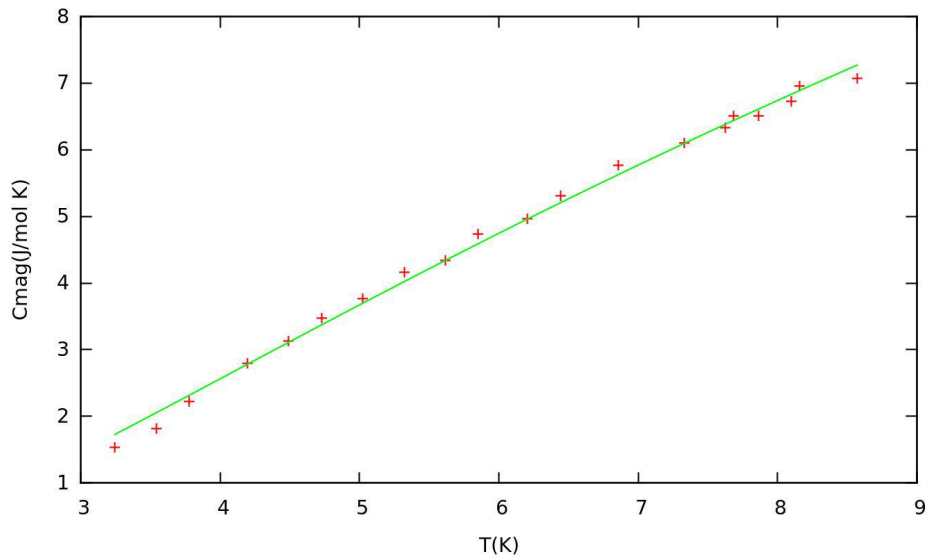


Figura 5.3: $C_{mag}(J/molK)$ de $GdNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 10kOe$

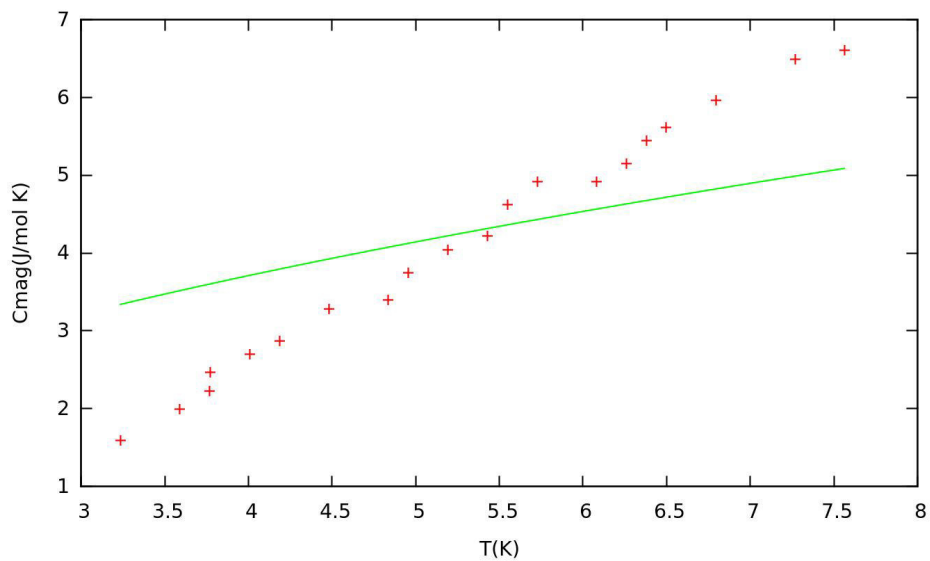
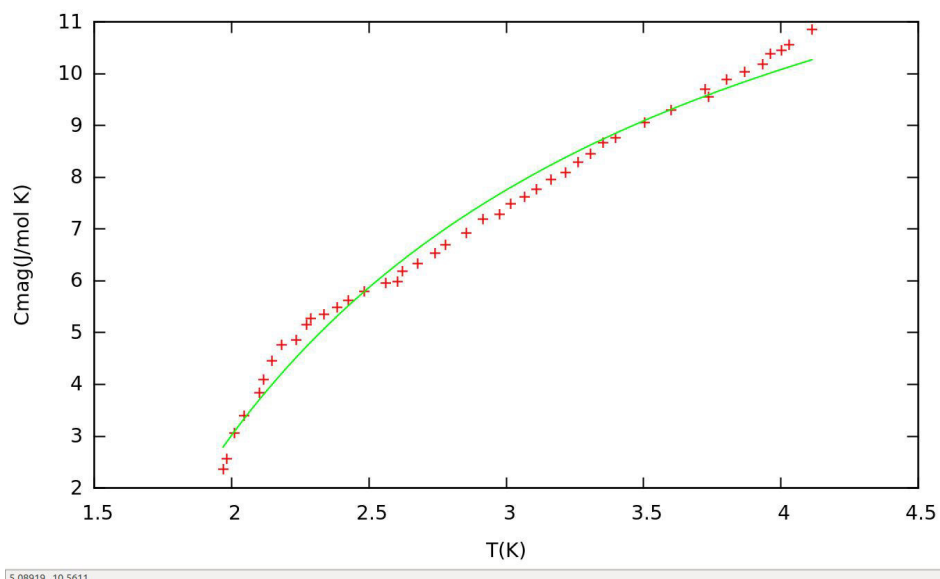


Figura 5.4: $C_{mag}(J/molK)$ de $GdNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 20kOe$

el punto de transformación . Cuando el campo magnético externo es $H = 10kOe$, $H = 14kOe$, no se observa punto de transformación entonces podemos interpretar que cuando el campo magnético externo es aumentado, el punto $T_{wf} = 2.2K$ no se manifiesta; esto no quiere decir que se pierde el punto de transformación sí no significa que el modelo de ondas de espín no describe este punto.

H (kOe)	Δ (K)	D (K)
0	7.0	3.0
5	6.2	18.68
10	9.3	8.58
14	17.5	0.18

Tabla 5.2: $ErNi_2B_2C$; H, Δ , DFigura 5.5: C_{mag} (J/molK) de $ErNi_2B_2C$ en función de Temperatura (K) $H = 0kOe$

5.4. $HoNi_2B_2C$

Mediante la técnica de difracción de neutrones y el calor específico, el $HoNi_2B_2C$ presenta diferentes estructuras magnéticas. Para $T < 5K$, el $HoNi_2B_2C$ presenta una estructura magnética antiferromagnética conmensurable. Debajo de $T = 8 K$ hay tres anomalías: $T_N = 5.2K$, $T_{H_1} = 5.6K$ y $T_M = 6.0K$, observadas por difracción de neutrón y el calor específico. Los datos de difracción de neutrones confirman las estructuras $q_N = c^*$ en T_N y estructura modulada $q_M = 0.586a^*$ en T_M . El pico en $T_{H_1} = 5.7K$, el comienzo de la estructura $q_{H_1} = 0.905c^*$, estructura magnética helicoidal. De acuerdo a la teoría de ondas de espín, y por medio de calor específico, solo se puede aplicar en el intervalo de $T < 5K$; el análisis no es adecuado para la descripción de la contribución de los magnones al estado modulado ya que los componentes del momento magnético no tienen igual magnitud. Cuando el campo magnético aumenta, algunos momentos

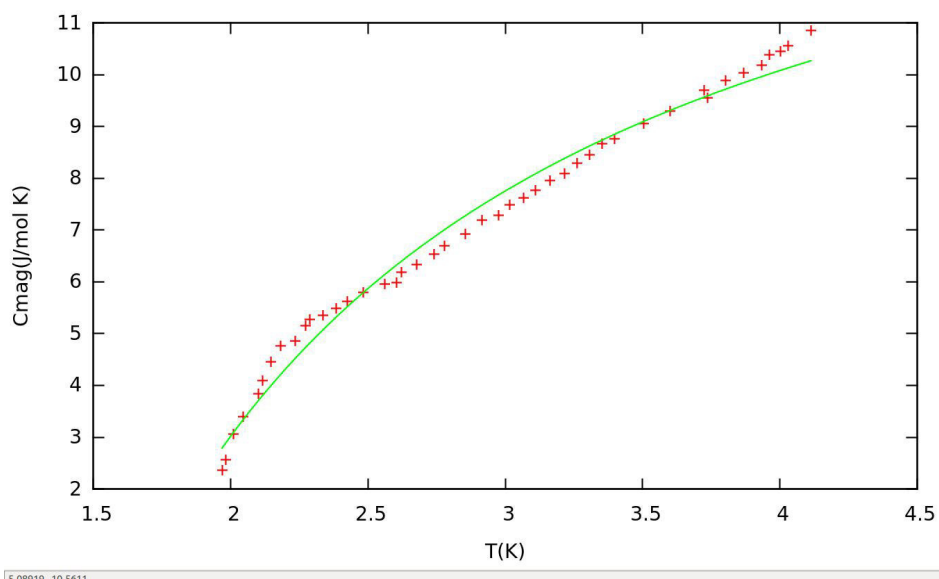


Figura 5.6: $C_{mag}(J/molK)$ de $ErNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 5kOe$

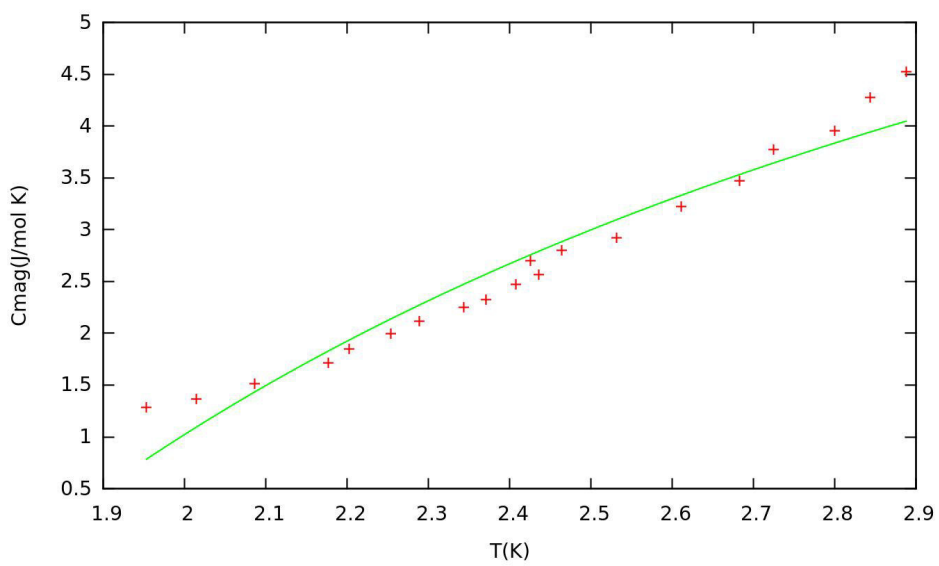


Figura 5.7: $C_{mag}(J/molK)$ de $ErNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 10kOe$

de los átomos de H_o tierras raras se alinean según el campo y se tiende a perder la estructura magnética. A temperaturas altas se pierde el orden magnético en la transición de fase; en sistemas físicos ocurren cambios estructurales muy rápidamente. El compuesto $HoNi_2B_2C$ tiene una estructura antiferromagnética como se describió en capítulo 2 de esta tesis. Los momentos magnéticos son forzados a alinearse en la dirección del

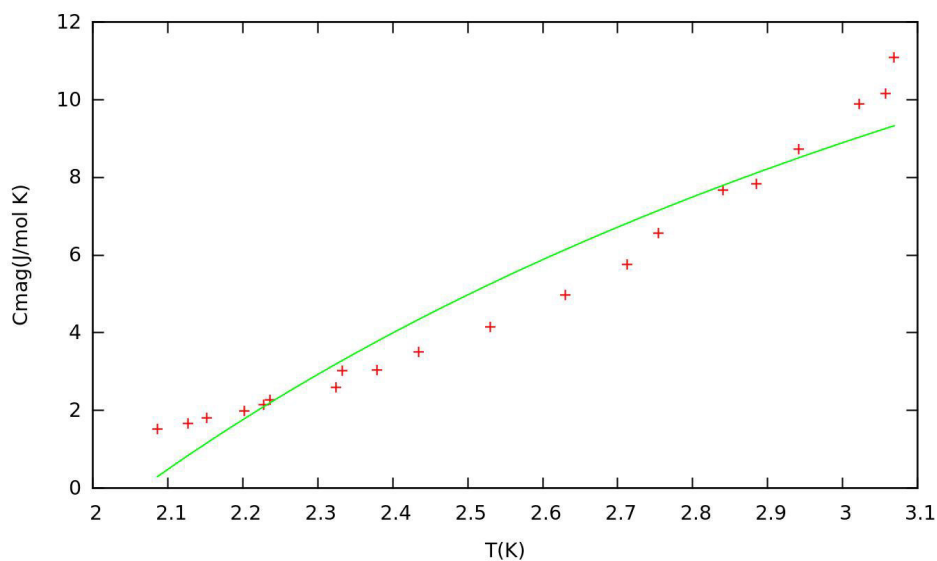


Figura 5.8: $C_{mag}(J/molK)$ de $ErNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 14kOe$

eje fácil $\langle 110 \rangle$ con Δ y D mostrados en la tabla 5.3

La contribución de los magnones al calor específico está modelada por la expresión (4.47). Para valores Δ y D , se aproxima bien a valores obtenidos experimentalmente ver las figuras

. En general, la evolución de $C_{mag}(T, H)$ dentro del estado magnético de los borocaruros de níquel RNi_2B_2C

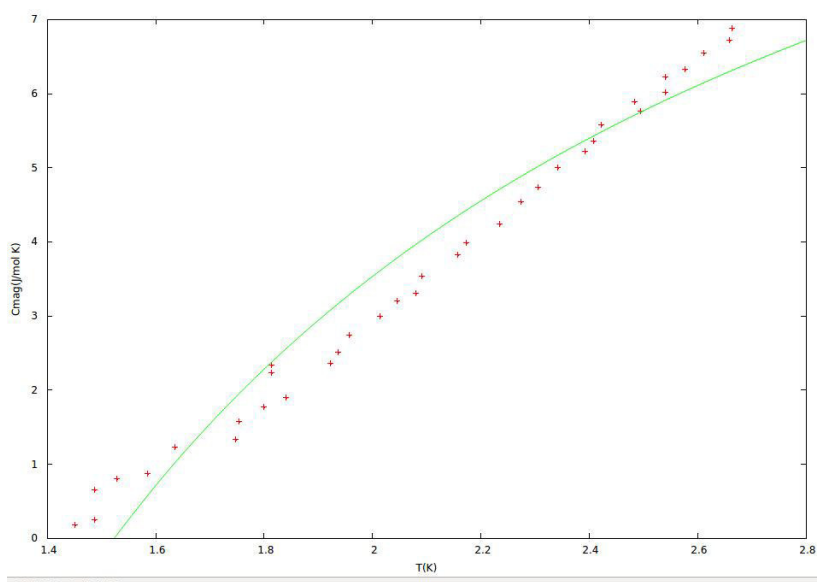


Figura 5.9: $C_{mag}(J/molK)$ de $HoNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 0kOe$

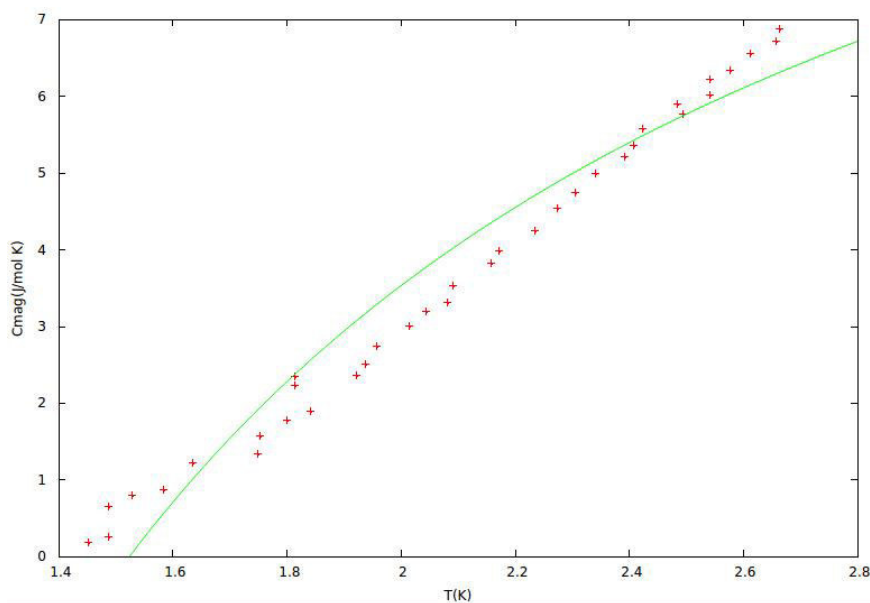


Figura 5.10: $C_{mag}(J/molK)$ de $HoNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 2.5kOe$

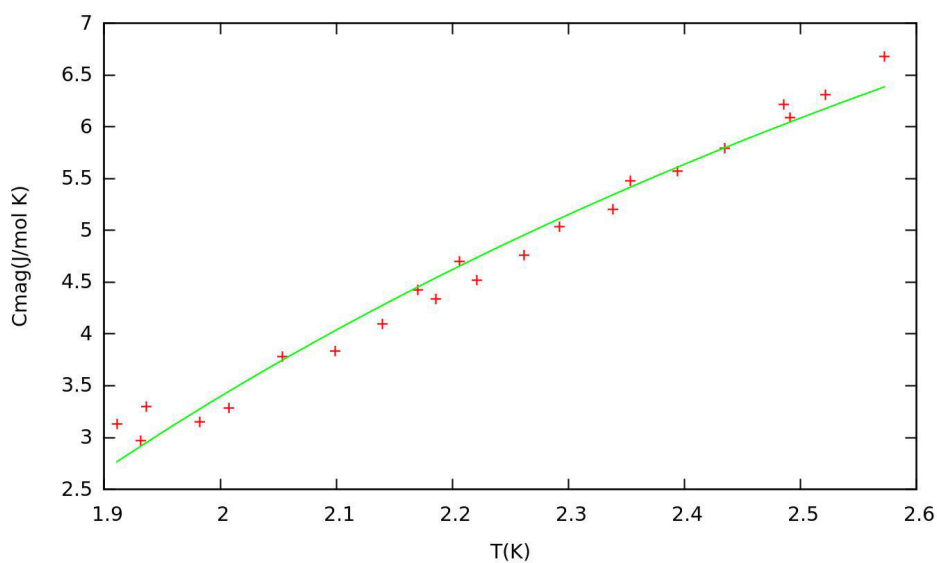


Figura 5.11: $C_{mag}(J/molK)$ de $HoNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 5kOe$

(R=Gd, Ho, Er) sirve para encontrar los rasgos característicos en el diagrama de fase. En este trabajo se prioriza el enfoque de la teoría de onda de espín que permite investigar en el intervalo de bajas temperaturas y campos magnéticos bajos. El análisis de onda de espín no es accesible para temperaturas altas. La linealiza-

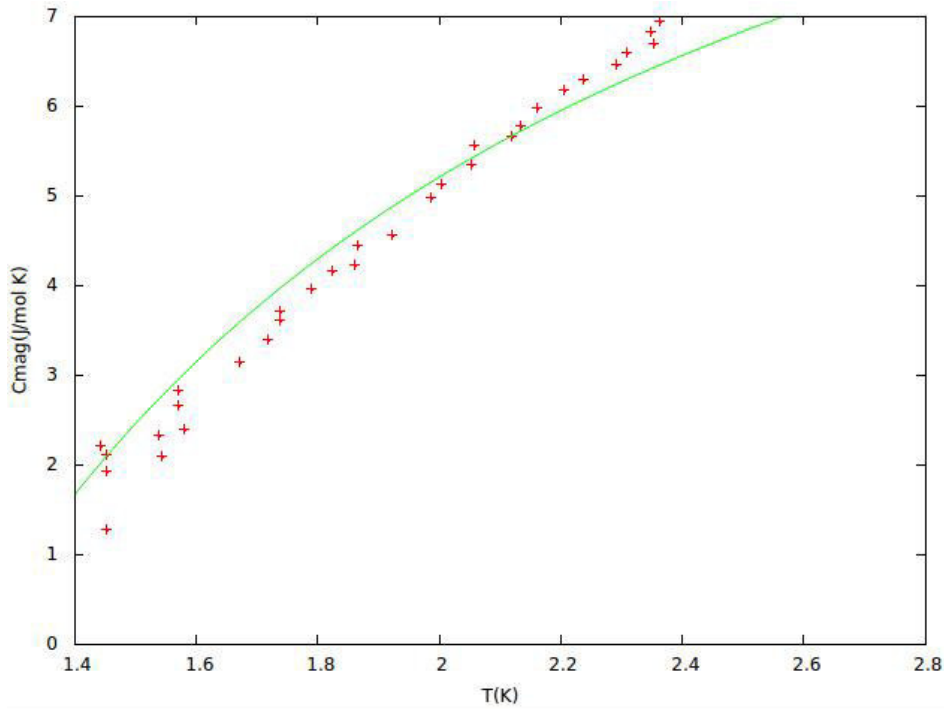


Figura 5.12: $C_{mag}(J/molK)$ de $HoNi_2B_2C$ en función de Temperatura(K) $H = 10kOe$

H (kOe)	Δ (K)	D (K)
0	7.7	4.6
2.5	8.5	4.8
5	10.8	2.93
10	8.8	6.7

Tabla 5.3: $HoNi_2B_2C$;H, Δ ,D

ción de magnon describe satisfactoriamente el resultado experimental para: $GdNi_2B_2C$, $H < H_R(T)$: para $ErNi_2B_2C$, $H < H_1(T < T_{WFM})$ y finalmente para $HoNi_2B_2C$, $H < H_1(T < T_N)$. En todos estos estados magnéticos la relación de dispersión resulta satisfactoria entre el valor calculado y el medido experimentalmente, de este modo se justifican toda las asunciones consideradas en ese modelo. Los valores de los parámetros están razonablemente bien. Por ejemplo, los valores del gap magnético para el $GdNi_2B_2C$ ($\Delta = 2.9$ K) son menores que la del $HoNi_2B_2C$ ($\Delta = 7.7$ K) y el $ErNi_2B_2C$ ($\Delta = 7.0$ K); el resultado refleja que la anisotropía del $GdNi_2B_2C$ es muy pequeño. Por otro lado , la constante de rigidez del $GdNi_2B_2C$ ($D = 5.5$ K) es más grande que la del $HoNi_2B_2C$ ($D = 4.6$ K) y la del $ErNi_2B_2C$ ($D = 3.0$ K). Un análisis en términos

de modelo de onda de espín es mostrar, que es muy útil, para describir las propiedades termodinámicas de estos compuestos magnéticos

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

La estructura magnética de los borocarburos de níquel RNi_2B_2C ($R = Ho, Gd, Er$), en intervalos definidos de temperatura presenta la fase antiferromagnética como indica el modelo de Neel. En el modelo teórico del sistema antiferromagnético, consideraremos un cristal constituido por dos subredes A y B insertas uno en la otra de tal modo que todos los vecinos inmediatos de cada ión de la subred A son iones de la subred B y viceversa. Los momentos magnéticos y los espines S de los iones A y B son iguales y tienen direcciones opuestas [47].

Con el objetivo de estudiar el aporte de los magnones al calor específico de los borocarburos de níquel en fase antiferromagnética RNi_2B_2C ($R = Ho, Gd, Er$), sabemos que estos compuestos contienen elementos de tierras raras que tienen propiedades magnéticas por tener iones semillenas en su capa 4f. Para obtener una información de estos compuestos se propone un hamiltoniano que describe la interacción entre los iones. Consideramos el efecto del campo eléctrico cristalino como un campo de anisotropía efectivo, y el campo magnético externo. Precisamente se estudia el aporte al calor específico en un campo magnético externo. Los resultados sin campo magnético externo ya fueron ampliamente estudiadas. Se propone un hamiltoniano que describe las propiedades físicas. Para resolver este hamiltoniano, se usó la teoría de ondas de espín, teniendo en cuenta las limitaciones de esta teoría, para obtener la relación de dispersión y densidad de estados de los magnones. Con este modelo se obtiene la relación de calor específico; para contrastar con los valores experimentales obtenidos [60], se consigue un ajuste aceptable para los compues-

tos RNi_2B_2C ($R = Ho, Gd, Er$). El modelo permite determinar la fase antiferromagnética para temperatura y campo magnético bajo. Las estructuras magnéticas conmensurable e inconmensurable, las estructuras magnéticas cercanas a las temperaturas de transformación no se determinan con este modelo, ya que las ondas de espín aumentan y llegan ser demasiado grandes y no es adecuado considerarlos como gas de magnones libres, porque comienza la interacción entre magnones. El estudio de esta interacción, nos permitirá explicar cuantitativamente las transiciones metamagnéticas presentes en los diagramas de fase de los compuestos. El calor específico está expresado en función de la temperatura y campo magnético externo, y contiene dos parámetros como son: constante de rigidez y el gap magnético, que son determinados experimentalmente. A futuro se pretende investigar detalladamente todos las fases magnéticas existentes, y dar un enfoque de la utilidad de estos compuestos, como por ejemplo plantear la utilización de corrientes de ondas de espín.

Bibliografía

- [1] M. ELMassalami, R. M.Saeed, C. M. Chaves, H. Takeya, M. Doerr, H. Michor, M. Rotter. «Specific heat investigation on the magnetic phase diagrams of RNi_2B_2C ($R=Gd,Er$)» Jour. Magn. Magn. Mat. **322**, 523-529 (2010).
- [2] J. F. Vento Flores. Propiedades magnéticas dos borocarbeto. Tese de doutorado, PUCRJ, Rio de Janeiro, Brasil (2002).
- [3] W. A. Fertig, D. C. Johnson, L. E. DeLong, R. W. McCallum, M. B. W. E. Pickett y D. J. Singh, $LuNi_2B_2C$: A Novel Ni-Based Strong Maple y B. T. Matthias, «Destruction of superconductivity at onset coupling superconductor», *Phys. Rev. Lett.* 72, 3702 (1994).
- [4] M. Ishikawa y Fischer, «Destruction of superconductivity by magnetic ordering in $Ho_{1.2}Mo_6S_8$ », *Solid State Comm.* 23, 37 (1977).
- [5] Canfield, P. C., P. L. Gammel, y D. J. Bishop. «A New Magnetic Superconductors: A Toy Box For Solid-State Physicists». *A Physics Today*, 51,(1998), 40.
- [6] K. H. Muller y V. N. Narozhnyi. Interaction of superconductivity y magnetism in borocarbide superconductors. . *Prog. Phys.* 64, 943 (2001).
- [7] Estructuras magnéticas y excitaciones en el Superconductor $HoNi_2^{11}B_2C$ estudiada por dispersión de neutrones. Para obtener el título Doctor en ciencias. Presentado por MICHAEL SCHNEIDER. Aceptado por la recomendación de Prof. Dr. M. Sigrist, Prof. Dr. A. Furrer, Prof Dr. P. Allenspach.2006

- [8] Blundell, S. *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University Press, New York (2001).
- [9] Hernando, A., y J. M. Rojo. *Física de los materiales magnéticos*. Editorial Sintesis, S.A, Madrid, 2001.
- [10] T. E. Grigereit, J. W. Lynn, Q. Huang, A. Santoro, R. J. Cava, J. J. Krajewski y W. F. Peck Jr., «Observation of oscillatory magnetic order in the antiferromagnetic superconductor $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$ », *Phys. Rev. Letters*. 73, 2756 (1994).
- [11] A. I. Goldman, C. Stassis, P. C. Canfield, J. Zarestky, P. Dervenagas, B. K. Cho, D. C. Johnston y B. Sternlieb, «Magnetic pair breaking in $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$ », *Phys. Rev. B* 50, 647 (1994).
- [12] T. Vogt, A. Goldman, B. Sternlieb y C. Stassis, *Phys. Rev. Letters*. 73, 2756 (1994).
- [13] T. E. Grigereit, J. W. Lynn, Q. Huang, A. Santoro, R. J. Cava, J. J. Krajewski y W. F. Peck Jr. *Phys. Rev. Letters*. 75, 2629 (1995).
- [14] J. P. Hill, B. J. Sternlieb, D. Gibbs, C. Detlefs, A. I. Goldman, C. Stassis, P. C. Canfield y B. K. Cho, «Incommensurate antiferromagnetism in the intermetallic superconductor $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$, Phys». *Rev. B* 53, 3487 (1996).
- [15] Alessandro Amici, Magnetic order y superconductivity in $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$, doctoral thesis. Max Planck Institute (1999).
- [16] R. Nagarajan, C. Mazumdar, Z. Hossain, S. K. Dhar, K. V. Gopalakrishnan, L. C. Gupta, C. Godart, B. D. Padalia y R. Vijayaraghavan, Bulk superconductivity at an elevated temperature ($T_C = 12$ K) in a nickel containing alloy system YNiBC , *Phys. Rev. Letters*. 72, 274 (1994).
- [17] R. J. Cava, H. Tagaki, H. W. Zandbergen, J. J. Krajewski, W. F. Peck Jr., T. Siegrist, B. Batlogg, R. B. van Dover, R. J. Felder, K. Mizuhashi, J. O. Lee, H. Eisaki y S. Uchida, «Superconductivity in the quaternary intermetallic compounds $\text{LnNi}_2\text{B}_2\text{C}$ », *Nature (London)* 367, 252 (1994).

- [18] V. L. Ginzburg, «Ferromagnetic Superconductors», *Sov. Phys. JETP* 4,153 (1957).
- [19] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, Microscopic theory of superconductivity, *Phys. Rev.* 108, 162 (1957).
- [20] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer. «Theory of superconductivity», *Phys. Rev.* 108, 1175 (1957).
- [21] P. W. Anderson, Theory of dirty superconductors, *J. Phys. Chem. Solids* 11, 26 (1959)
- [22] A. A. Abrikosov y L. P. Gorkov, «Contribution to the theory of superconducting alloys with paramagnetic impurities», *Sov. Phys. JETP* 12, 1243 (1961).
- [23] P. W. Anderson y H. Suhl, «Spin alignment in the superconducting state», *Phys. Rev.* 116, 898 (1959).
- [24] W. Baltensperger, S. Strassler: *Phys. Kondens. Mater.* 1, 20(1963).
L. F. Mattheiss, «Electronic properties of superconducting $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ a y related boride carbide phases», *Phys. Rev. B* 49, 13279 (1994).
- [25] B. Coqblin. The electronic structure of rare earth metals y alloys, *Academic Press*, London (1977).
- [26] P. C. Canfield, S. L. Budko, B. K. Cho, A. Lacerda, D. Farrell, E. Johnston-Halperin, V. A. Kalatsky y V. L. Pokrovsky, «Angular dependence of metamagnetic transitions in $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$ », *Phys. Rev. B* 55, 970 (1997).
- [27] S. Skanthakumar y J. W. Lynn. Technical report: rare earth magnetic order in $\text{RNi}_2\text{B}_2\text{C}$ and RNiBC . Department of Energy's (DOE), Argonne National Laboratory, IL, U.S.A (1998).
- [28] Detlefs C, Goldman A I, Stassis C, Canfield P C, Cho B K, Hill J P y Gibbs D. *Phys. Rev. B* 53, 6355 (1996).
- [29] S. L. Budko y P. C. Canfield, *Phys. Rev. B* 61, R14, 932 (2000).

- [30] J. W. Lynn, S. Skanthakumar, Q. Huang, S. K. Sinha, Z. Hossain, L. C. Gupta, R. Nagarajan, and C. Godart, *Phys. Rev. B* 55, 6584 (1997).
- [31] P. C. Canfield, S. L. Budko, y B. K. Cho, *Physica C* 262, 249 (1996).
- [32] H. Kawano Furukawa, H. Takeshita, M. Ochiai, T. Nagata, H. Yoshizawa, N. Furukawa, H. Takeya, y K. Kadowaki, *Phys. Rev. B* 65, 180508(R) (2002).
- [33] S. M. Choi, J. W. Lynn, D. Lopez, P. L. Gammel, P. C. Canfield, y S. L. Budko, *Phys. Rev. Letters*. 87, 107001 (2001).
- [34] A. J. Campbell, D. McK. Paul, y G. J. MacIntyre, *Solid state comm.* **115**, 213-216 (2000).
- [35] M. Doerr, M. Rotter, M. El Massalami, S. Sinning, H. Takeya, y M. Loewenhaupt, *J.Phys.Condens. Matter* 14, 5609 (2002).
- [36] A. J. Campbell, D. McK. Paul, y G. J. McIntyre, *Phys. Rev. B* 61, 5872 (2000).
- [37] P. C. Canfield, B. K. Cho, y D. C. Johnston, *Physica B* 215, 337 (1995).
- [38] C. Detlefs, A. I. Goldman, C. Stassis, P. C. Canfield, B. K. Cho, J. Hill, y D. Gibbs, *Phys. Rev. B* 53, 6355 (1996).36
- [39] K. Tomala, J. P. Sanchez, P. Vulliet, P. C. Canfield, Z. Drzazga, y A. Winiarska, *Phys. Rev. B* 58, 8534 (1998).
- [40] Canfield P C, Cho B K y Dennis K W 1995 *Physica B* 215 337
- [41] Mulder F M, Brabers J H V J, Coehoorn R, Thiel R C, Buschow K H J y de Boer F R 1995 *J.Alloys Compd.* 217, 118
- [42] Tomala K, Sanchez J P, Vulliet P, Canfield P C, Drzazga Z y Winiarska A. *Phys. Rev. B* 58 8534 (1998)

- [43] M. Massalami, H. Takeya, K. Hirata, M. Amara, R.M. Galera y D. Schmitt. *Magnetic Phase Diagram of GdNi₂B₂C: Two-ion Magnetoelasticity y Anisotropic Exchange Couplings* (2008).
- [44] P. Canfield y S. Budko, *J. Alloys Compounds* 262-263, 169 (1997).
- [45] C. Detlefs, F. Bourdarot, P. Bulet, P. Dervenagas, S. L. Budko, y P. C. Canfield, *Phys. Rev. B* 61, 916 (2000).
- [46] P. C. Canfield, S. L. Budko, and B. K. Cho, A. Lacerda, V. A. Kalatsky y V. L. Pokrovsky. *Angular dependence of metamagnetic transitions in HoNi₂B₂C* (1996).
- [47] A. S. Davidov. *Teoría del estado sólido*. Editorial Mir Moscú (1981).
- [48] C. Kittel. *The quantum theory of solids*, John Wiley and Sons Inc., New York (1963).
- [49] Norberto Majlis, *The quantum theory magnetism*, 2da. Edición, McGill University, Canada, Montréal (2007).
- [50] M. L. Krasnov, A. I. Kiseliyov, G. I. Makarenko, *Análisis vectorial*, Editorial Latinoamericana, Lima, Perú (1988).
- [51] Bogolyubov N. N. y Tyablikov S. V. Retarded and advanced green functions in statistical physics, *Soviet Physics Doklady*, Vol. 4, p. 589 (1959).
- [52] Yu. G. Rudoy. *Theoretical and mathematical physics* **168**, Iss. 3, pp 1318-1329 The Bogoliubov-Tyablikov green's function method in the quantum theory of magnetism (2011).
- [53] C. Mazumdar, R. Nagarajan, C. Godart, L.C. Gupta, M. La-troche, S.K. Dhar, C. Levy-Clement, B.D. Padalia and R. Vijayaraghavan, 20th Int. Conf. on Low Temperature Physics, Eugene, OR, 4-11 August 1993.

- [54] C. Mazumdar, R. Nagarajan, C. Godart, L.C. Gupta, M. La-troche, S.K. Dhar, C. Levy-Clement, B.D. Padalia and R. Vii Ayaraghavan, Int. Conf. on Strongly Correlated Electron Systems, San Diego, CA., 16-19 August 1993, Poster KE56.
- [55] P. Rogl, in K.A. Gschneidner, Jr., and L. Eyring (eds.), *Handbook on the physics and chemistry of rare earths*, Vol. 6, North-Holland, Amsterdam, 1984, Chapter 49.
- [56] Peter Mohn *An introduction magnetism in the solid state*. Editorial Springer 2006
- [57] C ANFIELD, P. C., S. L. BUDKO, y B. K. C HO. «Possible co-existence of superconductivity and weak ferromagnetism in $\text{ErNi}_2\text{B}_2\text{C}$.» *Physica C*, 262, (1996), 249.
- [58] B UZDIN, A.I., L.B ULAEVSKII, y S. S. C ROTOV. «Magnetic structures in the coexistence phase of superconductivity and weak ferromagnetism.» *Solid State Communications*, 48, (1983), 719.
- [59] C. Detlefs, A.I. Goldman, C. Stassis, P.C. Canfield, B.K. Cho, J.P. Hill, D. Gibbs, *Phys. Rev. B* 53 (10) (1996) 6355
- [60] M. ElMassalami and R. M. Saeed, C. M. Chaves Instituto de Fisica-UFRJ, CxP 68528, 21941-972, Rio de Janeiro, Brazil H. Takeya, National Institute for Materials Science, Sengen, Tsukuba, Ibaraki, 305-0047, Japan M. Doerr, Technische University Dresden, Dresden, Germany H. Michor, Technische University Wien, Austria M. Rotter, University of Oxford, Department of Physics Clarendon Laboratory, Parks Road Oxford *Specific heat in different magnetic phases of $\text{RNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($R = \text{Gd}, \text{Ho}, \text{Er}$): theory and experiment* (Dated: December 26, 2013)