

# **Cartografía de las transiciones electrónicas en cristales ferromagnéticos**

Rolando Saniz

*Departamento de Ciencias Exactas*

*Universidad Católica Boliviana, Casilla #5381, Cochabamba*

El conocimiento de las transiciones electrónicas posibles entre estados de un sistema, dentro del marco de la mecánica cuántica, es fundamental para poder comprender las propiedades del sistema y su respuesta a un estímulo exterior. En este trabajo estudiamos los ‘mapas’ de las transiciones de intercambio posibles entre estados electrónicos en un modelo de cristal ferromagnético, tomando en cuenta las transiciones de Stoner, con inversión del spin electrónico, y las transiciones sin inversión de spin. Estos mapas ponen en evidencia el origen de la estructura de la respuesta del material cuando sometido a un análisis de espectroscopía electrónica.

*Palabras clave:* Transiciones de Stoner; Espectroscopía electrónica; ferromagnetismo itinerante.

## **1. Introducción**

La estructura electrónica de un material juega un papel sumamente importante en determinar muchas de sus propiedades. Podemos citar, e.g. la resistividad, la reflectividad, la conductividad térmica, la susceptibilidad, y otras de gran interés práctico. Por esta razón es que una de las primeras tareas al estudiar un material es tratar de determinar teórica y experimentalmente su estructura electrónica. Desde el punto de vista teórico, existen hoy en día métodos sofisticados como FPLAPW (Full Potential Linear Augmented Plane Wave) o FPLMTO (Full Potential Linear Muffin-Tin Orbital), utilizando ambos

resultados de la teoría de la funcional de densidad. Desde el punto de vista experimental, existe una serie de métodos que se utilizan según el material que se desea estudiar. Se tiene, por ejemplo, la fotoemisión, uno de los primeros, y la difusión de muones, uno de los más recientes.

Entre los materiales más estudiados por su utilidad en la tecnología de información de hoy, están los materiales de ferromagnetismo itinerante. Los ejemplos más comunes de este tipo de material son los metales de transición Fe, Ni y Co. La gran diferencia entre éstos y otros materiales radica en que en ellos los niveles de energía electrónicos no presentan degeneración de spin. Este es precisamente el origen de su ferromagnetismo. En efecto, en los materiales ferromagnéticos existe una separación entre los niveles energéticos de los electrones con spin en un sentido y los electrones con spin opuesto, separación conocida como la separación de intercambio. Debido a esta separación, los niveles energéticos con un sentido de spin están en general por debajo los de sus semejantes de spin inverso, y por consiguiente más poblados. El hecho que los electrones en el material presentan un sentido preferencial de spin le confiere propiedades magnéticas por el momento magnético asociado al spin electrónico.

No es de extrañar, entonces, que uno de los métodos más utilizados en los últimos años en el estudio de materiales ferromagnéticos trata de distinguir entre electrones con spin opuesto. Se trata de la espectroscopia SPEELS, del inglés Spin-Polarised Electron Energy Loss Spectroscopy. Este método consiste en enviar un electrón de spin conocido sobre una muestra de material y en recoger el electrón difundido, midiendo su energía, cantidad de movimiento y spin. Si el spin del electrón recogido es diferente al del electrón incidente, se dice que ha habido una difusión con 'inversión de spin'. En realidad, este nombre se presta a confusión porque lo que ocurre en realidad es que el electrón incidente se queda en el material en un estado vacío con spin apropiado y el electrón recogido viene de un estado ocupado de spin opuesto. Más correctamente se habla de difusión con intercambio. Por otra parte, si el spin del electrón incidente y del electrón observado son iguales, puede haber ocurrido tanto una difusión

con intercambio, como una difusión ‘directa’, en la que el electrón incidente y el electrón difundido son el mismo.

Para interpretar los resultados de los métodos espectroscópicos, en general y no sólo en el caso de SPEELS, es útil determinar exactamente cuáles estados ocupados y cuáles estados libres pueden intervenir en los que se llama la creación de un par ‘electron-hueco’, es decir, el proceso por el cual un electrón pasa a ocupar un estado vacío y otro (o el mismo) deja un estado ocupado. En este trabajo estudiamos los ‘mapas’ de las transiciones posibles, tanto con intercambio como directas, de las parejas posibles en función de la energía de la pareja y de las bandas electrónicas a las que pertenecen. Este tipo de análisis ha demostrado ser útil en la elucidación de la fenomenología de la espectroscopía SPEELS aplicada a cristales ferromagnéticos [1]. En el presente estudio, hacemos un análisis más detallado de la dependencia de estos mapas respecto al ángulo de incidencia de los haces de electrones utilizados, así como de la faceta expuesta por los cristales. En la siguiente sección se presenta el modelo que cristal ferromagnético con el que se ha realizado el trabajo y la función respuesta del sistema que pone en evidencia la utilidad de los mapas mencionados. En Sección 3 se presentan los resultados principales de este estudio. Finalmente, en la Sección 4 se procede a comentar sobre los resultados del trabajo, incluyendo algunas conclusiones.

## 2. Modelo de cristal ferromagnético y función respuesta

Los materiales ferromagnéticos como el Fe, Ni o Co presentan un magnetismo itinerante, debido a su carácter metálico. Por esta razón, los niveles electrónicos se describen bien por funciones de onda de Bloch del tipo

$$\psi_{nk\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi_{nk}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \eta_{\sigma}. \quad (1)$$

En esta ecuación,  $N_0$  es el número de iones en el cristal,  $n$  es el índice de banda,  $\mathbf{k}$  el vector de onda y  $\eta_\sigma$  la función de spin. Escribimos las funciones de Wannier  $\phi_{n\mathbf{k}}$  como combinaciones lineales de orbitales atómicos  $\varphi_m$

$$\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_m b_{nm}(\mathbf{k})\varphi_m(\mathbf{r}). \quad (2)$$

En nuestro modelo tomamos en cuenta solamente los orbitales  $3d$ , que son los principales responsables del magnetismo en los metales de transición que se quiere modelizar. Los coeficientes  $b_{nm}$  diagonalizan el Hamiltoniano cristalino y están normalizados, de manera que definen una matriz unitaria. Para fijar parámetros, tomamos el caso del Fe. Los cinco orbitales  $3d$  fueron determinados en base a la aproximación de Griffith [2] y la constante de red se fijó en  $a=2.87 \text{ \AA}$  [3]. Definiendo  $a_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  como el operador de creación de una partícula en el estado de Bloch de vector de onda  $\mathbf{k}$  y spin  $s$  en la banda  $n$ , el Hamiltoniano de electrones independientes se escribe

$$H_0 = \sum_{n\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_n(\mathbf{p}) a_{n\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{n\mathbf{p}\sigma}, \quad (3)$$

donde las funciones  $\varepsilon_n(\mathbf{p})$  son las energías de banda paramagnéticas determinadas en el proceso de diagonalización. Como Hamiltoniano de interacción tomamos un modelo de Hubbard, a saber

$$H_I = \frac{1}{2} U \sum_{mm'} \sum_{j\sigma} n_{mj\sigma} n_{m'j-\sigma}, \quad (4)$$

donde las sumas se realizan sobre índices orbitales  $m, m'$ , los iones  $j$  y el spin  $\sigma$ . Es así que tenemos una repulsión de Coulomb  $U$  entre electrones de spin opuesto que se encuentran en el mismo ión. En la base de estados de Bloch, éste Hamiltoniano se escribe

$$H_I = \frac{1}{2} \frac{U}{N_0} \sum_{\substack{mm' \\ mm'}} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} c_{nm}(\mathbf{p} + \mathbf{q}', \mathbf{p}) c_{n'm'}(\mathbf{p}' - \mathbf{q}', \mathbf{p}') a_{n\mathbf{p}+\mathbf{q}'\sigma}^\dagger a_{m\mathbf{p}\sigma} a_{n'\mathbf{p}-\mathbf{q}'-\sigma}^\dagger a_{m'\mathbf{p}'-\sigma}, \quad (5)$$

donde hemos definido  $c_{nm}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_l b_{ln}(\mathbf{p}) b_{lm}(\mathbf{q})$ .

La sección eficaz de difusión de un electrón polarizado por un sistema de  $N$  electrones de electrones es proporcional a la parte imaginaria de una función retardada, dada por [4]

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = -\frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \frac{p_f}{p_i} \frac{1}{\pi} \frac{\text{Im} \chi_{\sigma_i\sigma_f}^R(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}, E)}{1 - e^{-\beta E}}, \quad (6)$$

donde  $E$  es la energía perdida,  $\Omega$  es el ángulo sólido,  $m$  la masa del electrón y  $\beta = 1/k_B T$ . La cantidad de movimiento transferida en la colisión es  $\mathbf{q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f$ , con  $\mathbf{p}_i$  y  $\mathbf{p}_f$  las cantidades de movimiento de los electrones incidente y difundido, respectivamente, y definiciones similares para los spin  $\sigma_i$  y  $\sigma_f$ . En el presente caso, la función retardada se puede obtener por continuación analítica de una función de correlación  $\chi$  que, como se ha demostrado anteriormente [1], se divide en dos

$$\chi_{\sigma_i\sigma_f}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}, i\omega_n) = \chi_{\sigma_i\sigma_f}^S(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}, i\omega_n) + \chi_{\sigma_i\sigma_f}^{MP}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}, i\omega_n). \quad (7)$$

El primer término es el que contiene las transiciones de Stoner, que son las que nos ocupan en este artículo. El segundo término contiene todos los efectos a muchas partículas, en particular los modos colectivos (ondas de spin). Tomando la continuación analítica  $i\omega_n \rightarrow E + i\eta$ , el término de Stoner se escribe

$$\chi_{\sigma_i\sigma_f}^S(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}, E) = \sum_{m'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{n\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_f} - f_{n\mathbf{k}\sigma_i}}{E + \varepsilon_{n'\sigma_f}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n\sigma_i}(\mathbf{k}) + i\eta} |W_{m'}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2. \quad (8)$$

En esta ecuación, hemos introducido la probabilidad de ocupación del estado  $n\mathbf{k}\sigma$ , definida por  $f_{n\mathbf{k}\sigma} = \langle a_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{n\mathbf{k}\sigma} \rangle$ , y la energía de las partículas individuales modificada por la energía de intercambio

$$\varepsilon_{n\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) - \frac{U}{N_0} \sum_{\mathbf{p}} f_{m\mathbf{p}\sigma}. \quad (9)$$

Es así que, en nuestro modelo, las bandas con spin hacia arriba y spin hacia abajo están rígidamente separadas por una cantidad  $\Delta = U(\langle n_\uparrow \rangle - \langle n_\downarrow \rangle)$ , donde

$$\langle n_\sigma \rangle = \frac{1}{N_0} \sum_{m\mathbf{p}} f_{m\mathbf{p}\sigma} \quad (10)$$

es el número medio por ión de estados con spin  $\sigma$ .

En la Figura 1(a) podemos ver las bandas de energía electrónicas de nuestro modelo, con la separación  $\Delta$  entre bandas con spin mayoritario y minoritario. El ancho de banda fue fijado a 4.7 eV, que corresponde aproximadamente al ancho de banda de los electrones 3d en el Fe [5]. La separación de bandas es de 2 eV. El nivel de Fermi fue determinado con la condición de tener 6 electrones por célula unitaria. En la Figura 1(b) podemos ver la densidad de estados electrónicos para ambas orientaciones de spin. Se pueden apreciar claramente las regiones enlace y anti-enlace, típicas de los materiales BCC con niveles  $d$  incompletos. Así, los picos más modestos corresponden a estados de simetría  $t_{2g}$  y los picos elevados a estados de simetría  $e_g$ . Esto últimos proveen de una gran cantidad de estados de spin opuesto a ambos lados del nivel de Fermi.

FIG. 1. (a) Estructura de bandas de energía del Fe en nuestro modelo para vectores de onda a lo largo de las direcciones de simetría principales. Las líneas continuas representan estados de spin mayoritario y las líneas punteadas estados de spin minoritario. (b) Densidad de estados electrónicos del Fe en nuestro modelo. La separación de bandas es de 2 eV.

Las transiciones de Stoner posibles están determinadas por los ceros de la Eq. (8) y la ocupación de los estados involucrados en la transición. Esto define lo que se conoce como densidad de estados de Stoner (cf. siguiente sección). Estas transiciones están ponderados por un peso definido por

$$W_{mm'}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{N_0}{V} \sum_{\mathbf{K}} \hat{p}(\mathbf{k} - \mathbf{p}_i - \mathbf{K}) \hat{\phi}_{m\mathbf{k}}^*(\mathbf{k} - \mathbf{K}) \hat{\phi}_{m\mathbf{k}-\mathbf{q}}(\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{K}). \quad (11)$$

Este término depende de las funciones de Wannier  $\hat{p}$  y de la interacción de Coulomb  $v$  entre el electrón incidente y los electrones del cristal. La suma es sobre la red de vectores recíprocos. El papel de este término en espectroscopía es muy importante y ha sido analizado en otro trabajo [1]. Como mencionado en la introducción, aquí nos concentraremos en la densidad de estados de Stoner.

### 3. Cartografía de los estados de Stoner

La densidad de estados de Stoner en función de la energía perdida y de las bandas de energía involucradas está definida por

$$\rho_{nm'}(E) = \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} (f_{n'\mathbf{k}-\mathbf{q}-\sigma} - f_{n\mathbf{k}\sigma}) \delta(E + \varepsilon_{n'-\sigma}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \varepsilon_{n\sigma}(\mathbf{k})), \quad (12)$$

donde  $\delta$  es la función delta de Dirac. En los experimentos espectroscópicos más comunes se emplea la geometría siguiente [6]. El haz de electrones incidentes tiene una polarización opuesta a la de la muestra. Luego, ésta expone la superficie (110) y el plano de difusión está definido por la normal a la superficie [110] y el eje [001]. Si denominamos  $u$  el eje perpendicular a la superficie, la cantidad de movimiento  $\mathbf{q}$  transferida en el proceso de difusión comúnmente empleada en el análisis de resultados experimentales se escribe

$$\begin{aligned} q_u &= p_i (\cos \theta - \text{sen } \theta \sqrt{1 - E/E_i}), \\ q_z &= p_i (\text{sen } \theta - \cos \theta \sqrt{1 - E/E_i}), \end{aligned} \quad (13)$$

donde  $\theta$  es el ángulo de incidencia. Esta cantidad de movimiento corresponde al caso en que el electrón incidente sufre primero una reflexión elástica sobre la red y/o los electrones de la misma, para luego sufrir una difusión inelástica que dirige al electrón difundido en la dirección de observación. Como se mostró en un anterior trabajo, existen otros dos procesos que contribuyen a la sección eficaz con la misma energía perdida e igual cantidad de movimiento transferida, a saber [7]

$$\begin{aligned} q'_u &= p_i (-\cos \theta + \text{sen } \theta \sqrt{1 - E/E_i}), \\ q''_u &= -p_i (\cos \theta + \text{sen } \theta \sqrt{1 - E/E_i}), \\ q'_z &= q'_z = q_z. \end{aligned} \quad (14)$$

En el segundo caso, a diferencia del primero, la reflexión elástica se produce después de la difusión inelástica. En el tercer caso tenemos un proceso de difusión inelástica puro, es decir que la cantidad de

movimiento transferida corresponde enteramente al cambio de cantidad de movimiento de la partícula difundida. Un análisis de la diferencia entre las contribuciones a la sección eficaz total de los tres procesos cae fuera del alcance de este trabajo. Sin embargo, podemos indicar que es difícil identificar experimentalmente las tres contribuciones, por lo que sólo se analiza la sección eficaz total.

En la Figura 2 presentamos los mapas de transiciones de Stoner posibles para diferentes ángulos de incidencia. Los tres ángulos considerados son  $45^\circ$ ,  $60^\circ$  y  $75^\circ$ , presentados en las Figuras 2(a), 2(b) y 2(c), respectivamente. Las curvas de nivel son curvas de igual densidad de transiciones o estados de Stoner en función de la energía absorbida por el par de Stoner y las bandas entre las que ocurrió la transición. La energía del electrón incidente es de 22 eV, que corresponde a la energía utilizada experimentalmente en la Ref. [6]. Lo primero que se observa es que se identifican exactamente las energías a las que se pueden producir transiciones entre las diferentes bandas. Las curvas de nivel dependen de manera muy sensible de la estructura de banda del material y constituyen en una ‘huella digital’ del mismo. Es así que estos mapas son además un instrumento útil y eficaz para distinguir entre diferentes modelos o cálculos de estructura de banda y para validarlos, ya que están ligados directamente a las observaciones experimentales. Luego vemos que las regiones de transición posibles son esencialmente las mismas en los tres casos. Sólo cambian las alturas relativas. Es decir que el ángulo de incidencia no determina las transiciones son posibles (que constituyen una propiedad del material), pero sí su cantidad. Estos mapas están directamente relacionados con uno de los trabajos más importantes en este campo. Hace varios años, Abraham y Hopster [8] midieron el espectro SPEELS del Ni con una alta resolución para un ángulo de incidencia de  $55^\circ$  y encontraron un umbral para las transiciones de Stoner alrededor de 65 meV. Interpretaron su resultado en términos de la estructura de banda  $3d$  del Ni a lo largo de la dirección  $\Gamma$ -X. Un mapa de las transiciones de Stoner entre bandas  $d$  para ese ángulo validaría o contestaría inmediatamente esa interpretación.

FIG. 2. Curvas de nivel de la densidad de transiciones de Stoner para un electrón incidente con una energía de 22 eV para diferentes ángulos de incidencia respecto a la normal [110]. El plano de difusión está dado por la normal y el eje [001]. Las transiciones posibles se identifican muy claramente, tanto en lo que respecta a la energía como a las bandas involucradas. Los ángulos de incidencia son los indicados por  $\theta$  en cada caso.

Los cálculos anteriores se realizaron para un haz de electrones incidentes sobre la superficie del cristal dada por la normal [110]. Uno bien puede preguntarse cuál es la influencia de la simetría del cristal sobre el espectro de incidencia, es decir, si se realiza una observación sobre otras facetas del cristal. La Figura 3 hace una comparación de los mapas de las transiciones de Stoner posibles para un cristal exponiendo tres facetas distintas, a saber [110], [100] y [111]. Vemos nuevamente que la diferencia entre los diferentes casos es relativamente leve. Como antes, esto se debe a que se toman en cuenta las transiciones posibles entre todos los estados dentro de la zona de Brillouin. Por consiguiente los experimentos realizados sobre diferentes facetas estudian las mismas transiciones. Es resultado es útil, sin embargo, porque diferentes facetas pueden ser más o menos prácticas desde el punto de vista experimental, e.g. el clivaje o la magnetización pueden ser más o menos simples de acuerdo a la dirección en el cristal.

FIG. 3. Curvas de nivel de la densidad de transiciones de Stoner posibles para un haz de electrones incidente sobre tres facetas distintas de un cristal de Fe. El ángulo de incidencia es  $60^\circ$  en los tres casos y la energía de incidencia de 22 eV. La faceta expuesta es la indicada por la normal en cada caso.

Finalmente, hemos considerado los mapas de transiciones de Stoner para un haz de electrones incidente con una polarización igual a la de la muestra. Esto es de interés puesto que experimentalmente es la denominada asimetría entre los espectros para haces polarizados paralela y antiparalelamente a la magnetización del cristal que pone en evidencia el espectro de Stoner (ver, por ejemplo, [6,8]). En

general, se supone que el espectro en el caso de un electrón mayoritario no presenta una estructura especial y que esto sirve para eliminar las transiciones directas del espectro de Stoner (i.e. aquellas en las que no existe intercambio, ver las obras citadas anteriormente). Por tanto, es importante analizar el mapa de transiciones de Stoner en las que el electrón se encuentra en un estado mayoritario y el hueco en un estado minoritario. En la Figura 4 presentamos las transiciones posibles en este caso para los mismos ángulos de incidencia que en la Figura 2. El hecho de que las densidades de estado son bajas es simplemente consecuencia de que existen muy pocos estados de spin mayoritario vacíos (ver Fig. 1(b)). Aparte de la ligera dependencia respecto al ángulo de incidencia, estas figuras nos muestran esencialmente dos cosas. Primero, que las transiciones de Stoner en cuestión están concentradas en energías bajas, alrededor de 0.5 eV y 1 eV, y comprenden sobre todo electrones en estados minoritarios del tipo  $t_{2g}$  (bandas  $3d$  inferiores) y huecos en estados mayoritarios  $e_g$  (bandas  $3d$  superiores). A pesar de que nuestro modelo es relativamente simple, explica muy bien los resultados experimentales de Venus y Kirschner. [6] En efecto, en dicha referencia se puede observar que los espectros para diferentes ángulos de incidencia en el caso de un electrón incidente mayoritario muestran sistemáticamente un máximo relativo en la sección eficaz por debajo de 1 eV. Segundo, que las transiciones consideradas no contribuyen al espectro en la región del pico de Stoner, que en general se encuentra por encima de la energía de separación de bandas  $\Delta$  [6,8] (2 eV en nuestro caso), y se limitan a bajas energías. Por consiguiente, toda estructura alrededor y por encima de la energía  $\Delta$  en el espectro se deberá a transiciones sin inversión de spin. Esto es importante porque nos da una indicación del grado de polarización del haz de electrones incidente, un parámetro que juega un papel fundamental en la determinación de la resolución experimental.

FIG. 4. Curvas de nivel de la densidad de transiciones de Stoner para electrones con spin mayoritario con una energía de 22 eV incidiendo sobre el cristal con diferentes ángulos respecto a la normal. Los ángulos

de incidencia son los indicados por  $\theta$  en cada caso. Las bajas densidades reflejan el hecho que existen muy pocos estados mayoritarios disponibles para una transición de Stoner.

#### 4. Comentarios y conclusiones

En este trabajo hemos estudiado los mapas de las transiciones de Stoner posibles en un modelo de cristal ferromagnético. Aunque se emplearon parámetros que corresponden al Fe, nuestros resultados son cualitativos y se aplican a cualquier material que presente magnetismo itinerante. Es así que un cálculo más preciso de los mapas de transiciones de Stoner, en base a modelos más exactos de la estructura electrónica de estos materiales, brindará información precisa para la interpretación de los resultados experimentales de espectroscopía SPEELS. Aquí es necesario indicar que la interpretación final de las observaciones experimentales deberá tomar en cuenta también el peso relativo de las diferentes transiciones  $W_{mn}$  (ver las ecuaciones (8) y (11)). Como se ha demostrado en un trabajo anterior [1], estos pesos reducen las transiciones importantes a un número relativamente pequeño de pares de bandas. De esta manera se tiene la información no sólo de cuáles transiciones son posibles, sino también de cuáles son las más determinantes. Es en este sentido que los mapas de transiciones de Stoner posibles constituyen un paso fundamental en el entendimiento e interpretación de la espectroscopía SPEELS. Podemos añadir que nuestros resultados sugieren que para explotar a fondo la espectroscopía SPEELS se requiere de una resolución experimental bastante fina. Por ejemplo, la resolución actual de 400 meV de Venus y Kirschner [6] es claramente insuficiente. Lamentablemente, no existen otros resultados experimentales sobre el espectro de Stoner más recientes en el caso del Fe. Kirschner y colaboradores realizaron un trabajo más recientemente en el que utilizan una resolución de 80 meV, pero sólo se concentraron en el estudio de las ondas de spin a baja energía. [9] En el caso del Ni existen los resultados de Abraham y Hopster en los que utilizaron una alta resolución de 25 meV, aunque la emplearon sólo para estudiar una región reducida del espectro. [8] Sería muy beneficioso si se pudiera emplear esta

resolución de manera sistemática en los experimentos SPEELS, tanto del Ni y el Fe, como del Co, que aún no fue estudiado. Los mapas de transiciones de Stoner y la espectroscopía SPEELS son instrumentos de investigación de mucho potencial y que en el futuro podrán contribuir a dar un paso más en la comprensión del magnetismo itinerante de los metales de transición.

## Agradecimientos

El autor desea agradecer al Dr. Suk Joo Youn por discusiones muy útiles sobre el tema de este trabajo. De igual modo desea agradecer al Prof. A. Paxton por hacerle llegar literatura sobre las funciones de onda atómicas.

## 5. Referencias

- [1] Saniz, R.; Apell, S. P. puesto a consideración de Phys. Rev. B **2000**.
- [2] Griffith, J. S. *The Theory of Transition-Metal Ions*, Cambridge University Press: Cambridge, 1961.
- [3] Ashcroft, N. W.; Mermin, N. D. *Solid State Physics*, Saunders College: Philadelphia, 1976.
- [4] Vignale, G.; Singwi, K. S. Phys. Rev. B **1985** 32, 2824.
- [5] Esta es una estimación del ancho de la banda  $d$  de electrones mayoritarios del Fe en el punto  $H$  basada en el método FPLMTO. R. Saniz (no publicado).
- [6] D. Venus, D.; Kirschner, K. Phys. Rev. B **1988** 37, 2199.
- [7] Saniz, R.; Apell, S. P. Phys. Rev. B **1993** 48, 3206.
- [8] Abraham, D. L.; Hopster, H. Phys. Rev. Lett. **1989** 62, 1157.
- [9] Plihal, M.; Mills, D. L.; Kirschner, J. Phys. Rev. Lett. **1999** 82, 2579.