## Índice General

| A  | Agradecimientos  |  |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
|----|--|--|---|----------|--|--|--|--|--|--|--|
| Re | Resumen i  |  |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
| A  | Abstract   |  |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
| 1. | Introduccion General   |  |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 1.1.   | Manga  | unitas con magnetoresistencia colosal   | 1        |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 1.2.   | Niquel   | atos $RNiO_3$ (R=tierras raras o Y)   | 9        |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 1.3.   | Perovs   | kitas dobles $ACu_2Fe_4O_{12}$ (A: Tierras raras o metales alcalinotérreos)   | 13       |  |  |  |  |  |  |  |
| Pa | arte   | I: Dina  | ámica de espines en óxidos de Mn y Ni con estructura de                       | <u>,</u> |  |  |  |  |  |  |  |
|    | $\mathbf{per}$   | ovskita  | L   | 23       |  |  |  |  |  |  |  |
| 2. | Magnones en manganitas laminares semidopadas: fase intermedia. |  |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 2.1.   | Introd   | ucción  | 25       |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 2.2.   | Model  | o para la fase intermedia   | 26       |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 2.3.   | Estabilidad de la fase intermedia para espines clásicos        |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 2.4.   | Caso cuántico: cálculo de excitaciones magnéticas              |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 2.5.   | 6. Resultados y discusión                                      |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
|    |  | 2.5.1.   | Efecto de acoplamientos $A_{d},K$ y del ángulo $\phi$                         | 38       |  |  |  |  |  |  |  |
|    |  | 2.5.2.   | Comparación entre efectos de acoplamientos $A_d$ y $F_c.$                     | 41       |  |  |  |  |  |  |  |
|    |  | 2.5.3.   | Manganita laminar $La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_4$                                     | 43       |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 2.6.   | Conclu   | siones  | 44       |  |  |  |  |  |  |  |
| 3. | Mag  | gnones   | para la fase intermedia de manganitas bilaminares semidopa-                   |          |  |  |  |  |  |  |  |
|    | das.   | ,  |   | 47       |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 3.1.   | Introd   | ucción  | 47       |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 3.2.   | Extensión del modelo para la fase intermedia al caso bilaminar |   |          |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 3.3.   | Result   | ados y discusión  | 51       |  |  |  |  |  |  |  |
|    |  | 3.3.1.   | Acoplamiento bicuadrático intra-cadenas, $K.\ \ldots\ \ldots\ \ldots\ \ldots$ | 52       |  |  |  |  |  |  |  |
|    |  | 3.3.2.   | Diferenciación de acoplamientos inter-cadenas $A \ge A'(\phi)$                | 54       |  |  |  |  |  |  |  |

|    |   | 3.3.3.   | Acoplamientos a segundos vecinos intra-cadena $F_{c}$ y $A_{d}$  | 55  |  |  |  |  |  |  |  |
|----|---|--|--|-----|--|--|--|--|--|--|--|
|    |   | 3.3.4.   | Acoplamientos a segundos vecinos $A_{s}$ y $B_{s}$   | 57  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 3.4.  | Ajuste   | s de los datos experimentales en $Pr(Ca_{0.9}Sr_{0.1})_2Mn_2O_7$   | 58  |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 3.4.1.   | Análisis de intercambio de $F_{c}$ y $A_{d}$ con mayor $A.$  | 58  |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 3.4.2.   | Ajustes alternativos para $Pr(Ca_{0.9}Sr_{0.1})_2Mn_2O_7$  | 60  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 3.5.  | Conclu   | isiones  | 62  |  |  |  |  |  |  |  |
| 4. | Excitaciones magnéticas de niquelatos de tierras raras tipo perovskita: |  |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | RNiO <sub>3</sub>   |  |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 4.1.  | Introd   | ucción   | 65  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 4.2.  | 2. Modelo simplificado: fase intermedia genérica unidimensional            |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 4.3.  | Estabi   | lidad de las fases clásicas  | 68  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 4.4.  | o de excitaciones magnéticas   | 70   |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 4.5.  | 4.5. Resultados y discusión: Predicción de magnones para las diferentes fa |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 4.6.  | 6. Conclusiones  |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
| Pa | arte I  | II: Pro  | piedades magnéticas y de transporte en la perovskita doble   |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | CaC   | $\mathbf{C}\mathbf{u}_{3}\mathbf{F}\mathbf{e}_{4}$                         | $D_{12}$ .   | 79  |  |  |  |  |  |  |  |
| 5. | Des   | cripcić  | on del CaCu <sub>3</sub> Fe <sub>4</sub> O <sub>12</sub> : disproporcionación de carga en Fe.                  | 81  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 5.1.  | Introd   | ucción   | 81  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 5.2.  | Antecedente: descripción del La $Cu_3Fe_4O_{12}$                           |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 5.3.  | Model  | Modelo microscópico para el Ca $Cu_3Fe_4O_{12}$  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 5.4.  | . Aproximaciones para el tratamiento del hamiltoniano                      |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 5.4.1.   | Aproximación en término de interacción magnética $\mathcal{H}_{S}$   | 88  |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 5.4.2.   | Aproximación en término de Hund $\mathcal{H}_{H}$  | 88  |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 5.4.3.   | Aproximación para los términos de interacción $\mathcal{H}_{int}$  | 89  |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 5.4.4.   | Aproximación para la energía cinética $\mathcal{H}_t$  | 90  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 5.5.  | Hamil  | toniano efectivo total   | 90  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 5.6.  | Densidad espectral de electrones itinerantes                               |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 5.7.  | 5.7. Energía libre del sistema   |  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 5.7.1.   | Implementación numérica para el calculo de la energía libre  | 97  |  |  |  |  |  |  |  |
|    | 5.8.  | Result   | ados y discusión   | 98  |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 5.8.1.   | Características principales de cada fase   | 99  |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 5.8.2.   | Energías libres y temperaturas de transición en el límite de bandas  |     |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   |  | angostas   | 104 |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   | 5.8.3.   | Diagramas de fase  | 109 |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   |  | I. Caso $\widetilde{G} > U_0 \ \left( \widetilde{G} = 1.108  U_0 \right)$                                      | 109 |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   |  | II. Caso $\widetilde{G} > U_0$ : efecto del incremento de $\widetilde{G}/U_0$ ( $\widetilde{G} = 1.324 U_0$ )  | 119 |  |  |  |  |  |  |  |
|    |   |  | III. Caso $\widetilde{G} < U_0 \ \left( \widetilde{G} = 0.892  U_0 \right) \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$ | 122 |  |  |  |  |  |  |  |

|    |  | 5.8.4.   | Mejor aj  | uste a los experimentos en $CaCu_3Fe_4O_{12}$ con el modelo |       |  |  |  |
|----|--|----------|-----------|---|-------|--|--|--|
|    |  |          | propuesto | 0   | . 126 |  |  |  |
|    |  |          | I.        | Comparación de magnetización experimental y nuestro ajus    | -     |  |  |  |
|    |  |          |           | te teórico  | . 127 |  |  |  |
|    |  |          | II.       | Dependencia con la temperatura de las ocupaciones totales   |       |  |  |  |
|    |  |          |           | en cada sitio de Fe   | . 128 |  |  |  |
|    | 5.9.                                       | Conclu   | siones    |   | . 129 |  |  |  |
| 6. | Con  | clusio   | nes gener | ales  | 133   |  |  |  |
| А. | Fase                                       | e interi | nedia: tr | atamiento de términos lineales del hamiltoniano.            | 139   |  |  |  |
| в. | Mat  | riz Ha   | miltonia  | na de fase intermedia bilaminar.                            | 141   |  |  |  |
| C. | Ene  | rgías n  | nagnética | as para las fases propuestas para $CaCu_3Fe_4O_{12}$        | 145   |  |  |  |
| D. | Ent  | ropía r  | nagnética | a de momentos localizados en $CaCu_3Fe_4O_{12}$ .           | 159   |  |  |  |
| Е. | Ene  | rgía lil | ore de ba | andas   | 163   |  |  |  |
| Bi | bliog                                      | rafía    |           |   | 167   |  |  |  |
| Ar | Anexos: Difusión de resultados de la tesis |          |           |   |       |  |  |  |