Índice de contenidos

Índice de símbolos v

Índice de contenidos vii

Índice de figuras xi

Índice de tablas xix

Resumen xxiii

Abstract xxv

1. Introducción 1

1.1. Efectos magnetoelásticos . . . 2
1.2. Sistemas $RMIn_5$ . . . 4
1.3. Sistemas a base de Gadolinio . . . 6
1.4. Estructura de la tesis . . . 11

2. Fundamentos teóricos y herramientas de cálculo 13

2.1. Energías presentes en los sistemas $GdMIn_5$ . . . 16
2.1.1. Energía de intercambio . . . 16
2.1.2. Energía dipolar . . . 19
2.1.3. Campo cristalino . . . 20
2.1.4. Energía elástica . . . 23
2.1.5. Energía Zeeman . . . 23
2.1.6. Frustración . . . 23
2.2. Técnicas númericas y analíticas utilizadas . . . 26
2.2.1. Campo medio . . . 27
2.2.2. Ondas de espín . . . 28
2.2.3. Método de Monte Carlo . . . 34
2.2.4. Aproximación de espines clásicos . . . 39
2.2.5. Resumen . . . 44

3. Técnicas Experimentales **47**
3.1. Crecimiento de monocristales . . . 48
3.2. Caracterizaciones primarias . . . 49
3.2.1. Espectrometría por dispersión de energía (EDS) . . . 49
3.2.2. Difracción de rayos X (DRX) . . . 50
3.2.3. Susceptibilidad magnética . . . 52
3.3. Dilatometría . . . 53
3.3.1. Expansión térmica . . . 59
3.3.2. Magnetostricción . . . 61
3.4. Otras Técnicas . . . 62
3.4.1. Calorimetría . . . 62
3.4.2. Método de cuatro puntas . . . 65
3.5. Resumen . . . 67

4. Resultados I: Conociendo a los monocristales **69**
4.1. Parámetros de crecimiento . . . 69
4.2. Caracterización composicional y estructural . . . 71
4.3. Susceptibilidad magnética . . . 74
4.4. Calor específico . . . 79
4.5. Expansión térmica . . . 80
4.6. Resistividad eléctrica . . . 81
4.7. Simulaciones . . . 82
4.7.1. Susceptibilidad magnética . . . 82
4.7.2. Calor específico . . . 85
4.7.3. ab-initio . . . 90
4.8. Conclusiones . . . 94

5. Resultados II: Campos magnéticos altos **97**
5.1. Susceptibilidad magnética . . . 97
5.2. Magnetostricción - Expansión térmica . . . 101
5.3. Magnetorresistencia . . . 107
5.4. Conclusiones . . . 109

6. Efectos Magnetoelásticos **111**
6.1. Importancia del modelo . . . 112
6.2. Presentación del modelo . . . 113
6.2.1. Parámetros iniciales . . . 115
6.3. Configuraciones de espines en el estado fundamental sin distorsiones . . . 116
6.4. Configuraciones de espines en el estado fundamental con distorsiones . . . 122
6.4.1. Energía Dipolar . . . 123

6.4.2. Energía del campo cristalino con deformación . . . 127
6.4.3. Energía de intercambio con deformaciones . . . 131
6.4.4. Resumen resultados numéricos . . . 136
6.5. Estudio analítico . . . 138
6.5.1. Estudio analítico sin campo . . . 140
6.5.2. Estudio analítico con campo . . . 146
6.5.3. Parámetros fenomenológicos . . . 155
6.5.4. $GdCoIn_5$ . . . 157
6.5.5. $GdRhIn_5$ . . . 163
6.6. Modificaciones en el estudio analítico . . . 164
6.7. Conclusiones . . . 168

7. Conclusiones **171**

8. Perspectivas **173**
8.1. Caracterización primaria . . . 173
8.2. Susceptibilidad magnética . . . 174
8.3. Magnetostricción . . . 176

A. Efectos del campo cristalino **181**

B. Quantum Monte Carlo **185**
B.1. Modelo utilizado . . . 187
B.2. Susceptibilidad magnética . . . 187
B.3. Calor específico . . . 190
B.4. Magnetización . . . 192
B.5. Simulaciones en el Gadolinio . . . 194
B.5.1. Deficiencias . . . 196

C. Ondas de espín **199**
C.1. Ondas de espín G-AFM (tipo ajedrez) . . . 199
C.2. Ondas de espín C-AFM (tipo cadenas) . . . 200

D. Constantes elásticas **201**
D.0.1. Sistemas $CeCoIn_5$ y $CeRhIn_5$ . . . 201
D.0.2. Cálculos DFT . . . 203
D.0.3. Valores finales . . . 204

Bibliografía **205**

Publicaciones asociadas **221**

Agradecimientos 223