

# Diagrama de fases magnéticas de aleaciones binarias desordenadas

E. López-Chávez y F. de Landa Castillo-Alvarado  
*Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional  
 Edificio 9 de la UPALM, Zacatenco 07738, México D.F. México*

Recibido el 20 de agosto de 1998; aceptado el 2 de junio de 1999

Usando el modelo de Hubbard se obtienen las soluciones del estado base de una aleación binaria metálica desordenada  $A_xB_{1-x}$ . La estructura electrónica se calcula usando el método de cúmulos en la red de Bethe y el tamaño de los momentos magnéticos locales en cada sitio de la red se determina autoconsistentemente. Encontramos que para un valor fijo del número de electrones  $n$  y diferentes valores de la integral de Coulomb  $U$ , el estado base del sistema presenta dos fases magnéticas: paramagneto de Pauli, para valores relativamente pequeños de  $U$ , y estados antiferrimagnéticos, los cuales aparecen cuando las correlaciones electrónicas intrasitio son más fuertes.

*Descriptores:* Transformaciones de fase magnéticas; aleaciones binarias desordenadas; hamiltoniano de Hubbard

The ground-state solutions of the Hubbard model of a metallic disordered binary alloy  $A_xB_{1-x}$  are studied. The electronic structure is solved within the Cluster Bethe-Lattice method, and the size of the local moments on each site are determined in a self-consistent manner. We find that, for various values of the Coulomb Integral ( $U$ ) and as a function of the number of electrons ( $n$ ), the ground state of the system presents two magnetic phases: Pauli paramagnet for small values of  $U$  and antiferromagnet states when  $U$  is stronger.

*Keywords:* Magnetic phase transition; disordered binary alloys; Hubbard Hamiltonian

PACS: 75.20.En

## 1. Introducción

Los trabajos que en la actualidad se están desarrollando a nivel mundial y en cuanto a nuevos materiales magnéticos se refiere, se encaminan hacia la determinación, tanto teórica como experimental, del efecto que elementos como el platino (Pt), el boro (B), el oxígeno (O), el bismuto (Bi), el rutenio (Ru), y el iridio (Ir) principalmente, tienen sobre las propiedades magnéticas y de microestructura de los metales de transición puros (Fe, Co, Ni) [1].

Algunos resultados de estas investigaciones han mostrado que aleaciones de Fe (FeSiB) y de Co (CoSiB) pueden usarse como sensores magnéticos [2] cuya aplicación se está dando en la medicina, en la megatrónica, en la conversión de energía y en el almacenamiento y procesamiento de información electrónica. Así mismo, aleaciones en forma de películas delgadas de  $Fe_{3-x}M_xO_4$  ( $M=Fe, Co, Ni$  y  $Zn$ ) se están aplicando en la construcción de dispositivos biomédicos, generadores de microondas y en electroquímica.

Todos estos resultados experimentales se fundamentan en la forma como se ve afectada la interacción de intercambio al formar aleaciones con los metales de transición. Es decir, para modificar la fase magnética de una sustancia se debe reestructurar la posición de las partículas constituyentes en ella. Para ello se podría cambiar su estructura, el tipo de átomos, crear imperfecciones en la red, etc. De ahí la importancia de desarrollar modelos teóricos que nos permitan determinar la fase magnética de un sólido bajo distintas condiciones de concentración de sus elementos constituyentes y temperatura.

En este trabajo presentamos una teoría microscópica que nos permite determinar las distintas formas de acoplamiento

de los momentos magnéticos de los átomos de una aleación binaria metálica desordenada  $A_xB_{1-x}$  en su estado base. Dicho acoplamiento nos indicará la fase magnética en la que se encuentra la aleación para distintos valores de la integral de Coulomb ( $U$ ) y del número de electrones ( $n$ ). Es decir, si el momento magnético en sitios ocupados por átomos A es igual al de los sitios ocupados por átomos B, la aleación se encontrará en el estado ferromagnético [3]. Evidentemente, en general, los momentos magnéticos en sitios ocupados por átomos de distinta clase deben ser diferentes, por lo cual se espera que esta fase no se presente en este tipo de aleaciones. Por otro lado, si los momentos magnéticos son iguales, pero de signo contrario ( $\mu_A = -\mu_B$ ), el sistema se encontrará en la fase antiferromagnética, la fase ferrimagnética se obtiene cuando  $\mu_A \neq \mu_B$ , y finalmente si los momentos magnéticos son diferentes en magnitud y en signo se tendrá la fase antiferrimagnética.

Algunos diagramas de fase de aleaciones binarias magnéticas de metales de transición que se ordenan del tipo  $A_{0.5}B_{0.5}$  en el estado base han sido obtenidos por Castillo-Alvarado, Dorantes-Dávila y Morán-López [3] usando el método de la red de Bethe. Ellos encuentran que para valores dados de  $U$ , y como una función del número de electrones, el estado base del sistema es un paramagneto de Pauli o un ferrimagneto. Más recientemente Farkasovsky [4] obtiene el diagrama de fase del modelo simplificado de Hubbard en un campo magnético externo. En este trabajo extendemos la teoría usada por Dorantes-Dávila, Morán-López y Avignon [5] para poder ser aplicada a las aleaciones binarias magnéticas desordenadas del tipo  $A_{0.5}B_{0.5}$ . Esta teoría tiene sus orígenes

en los trabajos realizados por Morán-López *et al.* [6, 7] para estudiar metales de transición y la influencia del ferromagnetismo en la temperatura crítica de transición orden-desorden espacial.

El método consiste en resolver la ecuación de movimiento de Dyson [8] usando un hamiltoniano de Hubbard [9] tomando, por simplificación, interacciones sólo a primeros vecinos y considerando un cúmulo de átomos en la red de Bethe [10] de igual número de coordinación al de la red real. Se resuelve la ecuación de Dyson por medio del método de funciones de Green, éstas se obtienen introduciendo funciones de transferencia para formar un conjunto de ecuaciones autoconsistentes. El desorden que consideramos es un desorden de tipo composicional, es decir, la red sigue siendo cristalina pero los átomos de la aleación se distribuyen aleatoriamente en sus sitios.

En la siguiente sección describimos el formalismo usado para obtener la densidad local de estados electrónicos en los sitios de la red (LDOS), los momentos magnéticos y el diagrama de fases magnéticas. En la Sec. 3 presentamos los resultados obtenidos usando el modelo y hacemos una breve discusión. Finalmente, en la Sec. 4 se plasman nuestras conclusiones y se mencionan los trabajos futuros a realizar.

## 2. Teoría

Consideremos una aleación que se ordena a bajas temperaturas con átomos A y B, los cuales se distribuyen en una red cúbica centrada en el cuerpo (*bcc*). Para describir el orden espacial en nuestro sistema, subdividimos los  $N$  sitios de la red en dos subredes equivalentes  $\alpha$  y  $\beta$ , tal que hay igual número de sitios tanto en la subred  $\alpha$  como en la  $\beta$ . Cada sitio  $\alpha$  tiene  $z$  sitios del tipo  $\beta$  como sus primeros vecinos y viceversa;  $z$  es el número de coordinación de la red real.

Es bien sabido que en los metales de transición sus electrones  $d$  son los responsables del magnetismo, de manera que si consideramos los cinco orbitales  $d$  que existen en cada sitio de la red, al calcular de manera autoconsistente las energías en el sitio  $i$  debidas a electrones con espín  $\sigma$  en el estado  $\nu$ , denotadas por  $\epsilon_{i\nu,\sigma}$ , y las integrales de traslape  $t_{ij}^{\nu\mu}$ , las cuales representan la energía para aniquilar al electrón en el estado  $\mu$  del sitio  $i$  y crearlo en el estado  $\nu$  del sitio  $j$ , el problema se complicaría bastante. Por ello, para obtener la estructura electrónica de la aleación, nosotros tomamos el hamiltoniano de Hubbard [Ec. (3)], considerando la banda  $d$  completamente degenerada, de manera que es posible describir los estados monoeléctricos por medio de orbitales  $s$ . Haciendo esta consideración, la densidad local de estados de energía se multiplica con un factor de peso.

La forma de calcular la densidad local de estados electrónicos es la siguiente: elegimos un átomo de la red real como punto de referencia y lo conectamos a una red de Bethe de igual número de coordinación para simular los efectos del resto de la aleación sobre el átomo de referencia. La densidad local de estados en el sitio  $i$  para electrones con espín  $\sigma$  en el

formalismo de las funciones de Green está dada simplemente por

$$\rho(\epsilon)_i^\sigma = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr} \langle i\sigma | G | i\sigma \rangle, \quad (1)$$

donde  $|i\sigma\rangle$  representa un orbital  $s$  de un electrón con espín  $\sigma$  sobre el átomo en el sitio  $i$ .

Las funciones locales de Green, se obtuvieron resolviendo la ecuación de Dyson:

$$\epsilon G = I + HG, \quad (2)$$

donde  $\epsilon$  es la energía del electrón,  $G$  el operador de Green,  $I$  el operador identidad y  $H$  el hamiltoniano de Hubbard en la aproximación de Hartree-Fock no restringida, el cual está dado por

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} |i,\sigma\rangle\langle j,\sigma| + \sum_{i,\sigma} \epsilon_{i,\sigma} |i,\sigma\rangle\langle i,\sigma|, \quad (3)$$

donde  $t_{ij}$  denota la integral de traslape para transiciones electrónicas entre los sitios  $i$  y  $j$ ,  $\sigma$  es el índice de espín (hacia arriba ( $\uparrow$ ) o hacia abajo ( $\downarrow$ )),  $\epsilon_{i,\sigma}$  es la energía en el sitio  $i$  debida a los electrones con spin  $\sigma$  la cual está dada por

$$\epsilon_{i,\sigma} = \epsilon_i^0 + \frac{n_i \pm \mu_i}{2} U. \quad (4)$$

En esta ecuación el signo menos se usa para electrones con espín hacia arriba y el signo más para electrones con espín hacia abajo,  $\epsilon_i^0$  representa la energía del átomo puro localizado en el sitio  $i$ ,  $U$  es la integral de Coulomb,  $n_i$  es el número de electrones en el sitio  $i$ ,  $\mu_i$  es el momento magnético local del átomo en el  $i$ -ésimo sitio; las dos últimas cantidades se calculan, respectivamente, mediante las ecuaciones

$$n_i = \langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle, \quad (5)$$

$$\mu_i = \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle, \quad i = A, B. \quad (6)$$

En estas dos últimas ecuaciones  $\langle n_{i\sigma} \rangle$  es el número promedio de electrones con espín  $\sigma$  ( $\uparrow, \downarrow$ ) en el sitio atómico  $i$ . Este se calcula mediante la ecuación

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{E_f} d\epsilon \text{Im} G_{00,\sigma}^{i\xi}(\epsilon). \quad (7)$$

Las funciones locales de Green  $G_{00,\sigma}^{i\xi}(\epsilon)$ , para electrones con espín  $\sigma$  en un sitio de la subred  $\xi$  ( $= \alpha, \beta$ ) las determinamos mediante las siguientes ecuaciones:

$$(\epsilon - \epsilon_A^\sigma) G_{00,\sigma}^{A\xi} = 1 + z(xt_1 G_{10,\sigma}^{A\kappa} + yt_2 G_{10,\sigma}^{B\kappa}), \quad (8)$$

$$(\epsilon - \epsilon_B^\sigma) G_{00,\sigma}^{B\xi} = 1 + z(xt_2 G_{10,\sigma}^{A\kappa} + yt_3 G_{10,\sigma}^{B\kappa}). \quad (9)$$

Mientras que las funciones de Green  $G_{n0,\sigma}^{i\xi}(\epsilon)$  en un sitio  $n$  que pertenece a la subred  $\alpha$  las obtenemos del siguiente con-

junto de ecuaciones:

$$(\varepsilon - \varepsilon_A^\sigma)G_{n,0;\sigma}^{A\alpha} = t_1 G_{n-1,0;\sigma}^{A\beta} + (z-1)(t_1 x G_{n+1,0;\sigma}^{A\beta} + t_2 y G_{n+1,0;\sigma}^{B\beta}), \quad (10)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_A^\sigma)G_{n,0;\sigma}^{A\alpha} = t_2 G_{n-1,0;\sigma}^{B\beta} + (z-1)(t_1 x G_{n+1,0;\sigma}^{A\beta} + t_2 y G_{n+1,0;\sigma}^{B\beta}), \quad (11)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_B^\sigma)G_{n,0;\sigma}^{B\alpha} = t_2 G_{n-1,0;\sigma}^{A\beta} + (z-1)(t_2 x G_{n+1,0;\sigma}^{A\beta} + t_3 y G_{n+1,0;\sigma}^{B\beta}), \quad (12)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_B^\sigma)G_{n,0;\sigma}^{B\alpha} = t_3 G_{n-1,0;\sigma}^{B\beta} + (z-1)(t_2 x G_{n+1,0;\sigma}^{A\beta} + t_3 y G_{n+1,0;\sigma}^{B\beta}), \quad (13)$$

en donde  $t_1 = t_{AA}$ ,  $t_2 = t_{AB}$ ,  $t_3 = t_{BB}$  son las integrales de traslape,  $x$  es la concentración de átomos A,  $y = 1 - x$  es la concentración de átomos B.

Ecuaciones similares se obtienen en caso de que el sitio  $n$  perteneciera a la subred  $\beta$ . Esta formulación permitirá considerar, para trabajos futuros, orden de corto y largo alcance. Aquí consideramos el caso particular completamente desordenado.

El conjunto de Ecs. (8), (9), (10), (11), (12) y (13) podrán ser resueltas en la aproximación de cúmulos en la red de Bethe definiendo las siguientes funciones de transferencia:

$$\gamma_{1\sigma} = \frac{G_{n,0;\sigma}^{A\alpha}}{G_{n-1,0;\sigma}^{A\beta}}, \quad (14)$$

$$\gamma_{2\sigma} = \frac{G_{n,0;\sigma}^{A\alpha}}{G_{n-1,0;\sigma}^{B\beta}}, \quad (15)$$

$$\gamma_{3\sigma} = \frac{G_{n,0;\sigma}^{B\alpha}}{G_{n-1,0;\sigma}^{A\beta}}, \quad (16)$$

$$\gamma_{4\sigma} = \frac{G_{n,0;\sigma}^{B\alpha}}{G_{n-1,0;\sigma}^{B\beta}}. \quad (17)$$

Para el caso completamente desordenado, que es el que se está estudiando, las dos subredes son equivalentes por lo cual  $G_{0,0;\sigma}^{A\alpha} = G_{0,0;\sigma}^{A\beta}$ ;  $G_{0,0;\sigma}^{B\alpha} = G_{0,0;\sigma}^{B\beta}$ ; entonces las Ecs. (10), (11), (12) y (13) pueden ser expresadas en términos de las funciones de transferencia como

$$(\varepsilon - \varepsilon_A^\sigma)\gamma_{1\sigma} = t_1 + (z-1)(t_1 x \gamma_{1\sigma}^2 + t_2 y \gamma_{1\sigma} \gamma_{3\sigma}), \quad (18)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_A^\sigma)\gamma_{2\sigma} = t_2 + (z-1)(t_1 x \gamma_{1\sigma} \gamma_{2\sigma} + t_2 y \gamma_{2\sigma} \gamma_{3\sigma}), \quad (19)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_B^\sigma)\gamma_{3\sigma} = t_2 + (z-1)(t_3 x \gamma_{4\sigma} \gamma_{3\sigma} + t_2 x \gamma_{2\sigma} \gamma_{3\sigma}), \quad (20)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_B^\sigma)\gamma_{4\sigma} = t_3 + (z-1)(t_3 y \gamma_{4\sigma}^2 + t_2 x \gamma_{2\sigma} \gamma_{4\sigma}), \quad (21)$$

las cuales forman un sistema de cuatro ecuaciones cuadráticas acopladas que al combinarlas se obtiene una ecuación de cuarto grado para cualquiera de las funciones de transferencia  $\gamma_{i\sigma}$ .

El nivel de Fermi lo determinamos usando la expresión de conservación de carga

$$n = xn_A + yn_B. \quad (22)$$

Así que resolviendo todas las ecuaciones autoconsistentemente obtenemos los momentos magnéticos locales  $\mu_A$  ó  $\mu_B$ , de donde se obtienen las configuraciones ferro, ferri, antiferromagnético y antiferrimagnético. De estos últimos resultados obtenemos el diagrama de fases magnéticas de la aleación.

### 3. Resultados y discusión

Los parámetros usados en los cálculos corresponden aproximadamente a la aleación binaria metálica  $\text{Co}_x\text{Fe}_{1-x}$ , la cual es uno de los sistemas con características similares al modelo usado.

Los parámetros de la energía iniciales usados en los cálculos, los cuales describen las interacciones inter e intrasitio en el hamiltoniano de la aleación, se determinan a partir de las propiedades de los elementos puros que la constituyen y se supone que son independientes de la transferencia de carga. Así, la diferencia  $\varepsilon_{\text{Co}}^0 - \varepsilon_{\text{Fe}}^0$  se tomó como la diferencia de los potenciales de ionización de los átomos constituyentes [11]. A las integrales de traslape  $t_{AA}$  y  $t_{BB}$  se les asignaron los valores 1.3874 eV y 1.4063 eV, respectivamente, los cuales están muy próximos a los estimados considerando el ancho de banda de los elementos puros [12, 13]. El parámetro  $t_{\text{Co-Fe}}$  se calcula como la media geométrica de las dos primeras integrales.

Los valores de energía de las integrales de Coulomb  $U$  que se usaron caen dentro del rango de valores de energía que se necesita para que un electrón  $d$  se transfiera desde un átomo de Fe hasta uno de sus primeros vecinos, los cuales pueden ser átomos de Fe o de Co [14, 15]. Además de los parámetros de energía se tiene que los números de valencia  $n_{\text{Co}}^0$  y  $n_{\text{Fe}}^0$ , así como la concentración  $x = 0.5$  son necesarios para iniciar nuestros cálculos. El número promedio de electrones por sitio o número de llenado  $n$  que se tomó en estos cálculos fue de 6.

En las Figs. 1a y 1b se presenta la densidad local de estados electrónicos (LDOS) de electrones en sitios ocupados por átomos A(Co) con espín hacia arriba y espín hacia abajo, respectivamente, para una integral de Coulomb de 2 eV. Se puede apreciar que ambas curvas tienen la misma forma, sin embargo los bordes de la banda, aunque aparentemente son los mismos, difieren mínimamente, lo cual indica que el número promedio de electrones con espín hacia arriba debe ser casi igual al número promedio de electrones con espín hacia abajo, dando un momento magnético total en ese sitio de aproximadamente cero ( $0.0034 \mu_B$ ). Así mismo, de las Figs. 1c y 1d, las cuales muestran la densidad local de estados electrónicos con espín hacia arriba y espín hacia abajo de sitios ocupados por átomos B(Fe) para el mismo valor de 2 eV de la integral de Coulomb, se encuentra que el momento magnético total en dicho sitio es también aproximadamente

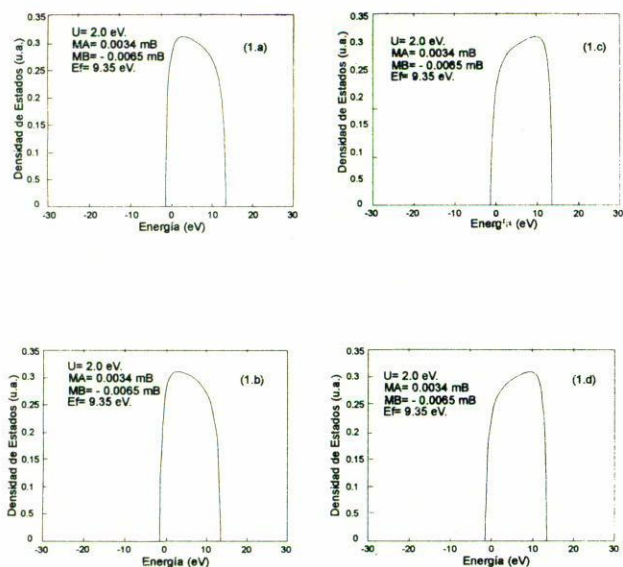


FIGURA 1. Densidad local de estados electrónicos como función de la energía (LDOS) en sitios ocupados por átomos A y B correspondientes a una integral de Coulomb de 2 eV. Electrones con espín (a) hacia arriba y (b) hacia abajo en el sitio A. Electrones con espín (c) hacia arriba y (d) hacia abajo en el sitio B.

cero ( $-0.0065 \mu_B$ ). De esta forma se obtiene un primer punto del diagrama de fases magnéticas (Fig. 4), el cual corresponde a un estado próximo al paramagneto de Pauli. En realidad rigurosamente se tiene un estado antiferromagnético. Ya que estas cuatro primeras gráficas son casi idénticas se tiene que la transferencia de carga, en estas condiciones es prácticamente nula, además el valor de  $U$  no es suficiente para empezar a dividir la banda.

Las Figs. 2a y 2b muestran la LDOS de electrones con espín hacia arriba y con espín hacia abajo, respectivamente, en sitios ocupados por átomos A, mientras que las Figs. 2c y 2d presentan las LDOS para electrones con espín hacia arriba y con espín hacia abajo, respectivamente, en sitios ocupados por átomos B; todas ellas para una integral de Coulomb de 4 eV. En ellas se puede apreciar que las curvas de LDOS en los sitios A y B, para electrones con la misma orientación de espín, son de forma simétrica una respecto a la otra. Además, las LDOS para el mismo sitio (A o B) y para electrones con espín opuesto son también de forma simétrica, aunque los bordes se encuentran en valores diferentes. Esto nos indica que el número promedio de electrones con espín hacia arriba en el sitio ocupado por el átomo A es diferente al número promedio de electrones con espín hacia abajo en ese mismo sitio. Lo mismo encontramos para los sitios ocupados por átomos B. Entonces el momento magnético total en el sitio A es de magnitud y signo diferente al del sitio B, esto correspondería a un punto de estado o fase antiferromagnética en el diagrama de fases. Una observación importante es que a partir de este valor de la integral de Coulomb se empieza a formar una pequeña brecha de energía, esto debido a que la interacción electrón-electrón empieza a tener efectos considerables.

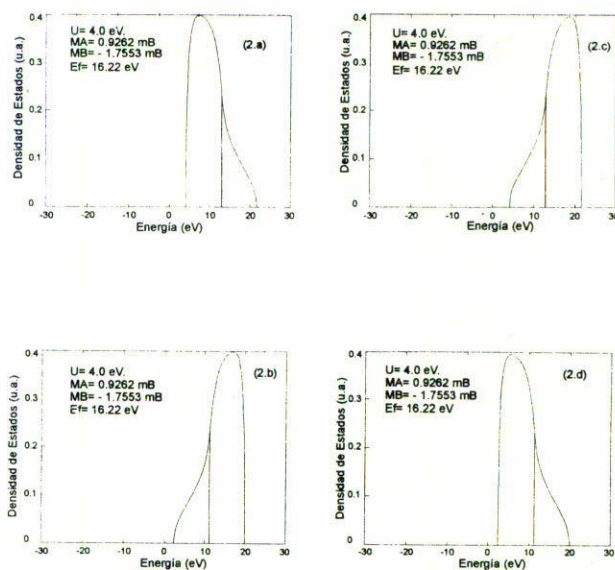


FIGURA 2. Densidad local de estados electrónicos como función de la energía (LDOS) en sitios ocupados por átomos A y B correspondientes a una integral de Coulomb de 4 eV. Electrones con espín (a) hacia arriba y (b) hacia abajo en el sitio A. Electrones con espín (c) hacia arriba y (d) hacia abajo en el sitio B.

Las Figs. 3a y 3b presentan las curvas de LDOS para electrones con espín hacia arriba y espín hacia abajo, respectivamente, en sitios ocupados por átomos A y con un valor de la integral de Coulomb de 5 eV; se observa que las curvas están invertidas una respecto a la otra, lo cual indica que los números promedio de ocupación de electrones son diferentes, obteniéndose un momento magnético para este sitio diferente de cero. Lo mismo concluimos de las Figs. 3c y 3d, pero ahora para sitios ocupados por átomos B; es decir, el momento magnético para este sitio es diferente de cero pero de magnitud y signo diferente al del momento magnético en el sitio A, como se puede apreciar en estas últimas cuatro gráficas; por lo cual la fase correspondiente a  $U = 5$  eV es antiferromagnética. Observamos también en estas últimas cuatro gráficas la formación de una brecha de energía de tamaño un poco mayor al formado para  $U = 4$  eV. Esto significa que se formarán brechas de energía, con anchura cada vez mayor, en la medida que la correlación entre electrones sea mayor.

Finalmente, en la Fig. 4 presentamos el diagrama de fases magnéticas para la aleación desordenada. Ahí podemos apreciar dos fases distintas para la aleación considerada: paramagneto de Pauli, la cual se tiene para valores bajos de la integral de Coulomb y estados antiferromagnetos para valores relativamente grandes de dicha integral.

#### 4. Conclusiones

Se presentó una teoría microscópica que considera correlaciones electrónicas intra-atómicas, la cual se aplica para obtener propiedades magnéticas de aleaciones binarias metálicas desordenadas.

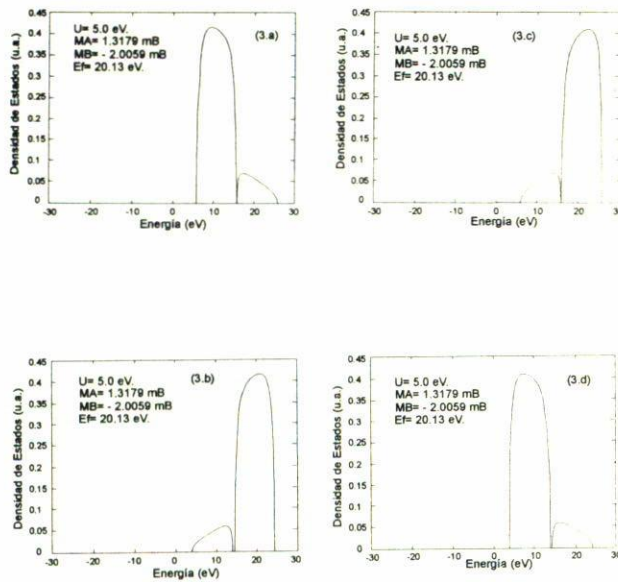


FIGURA 3. Densidad local de estados electrónicos como función de la energía (LDOS) en sitios ocupados por átomos A y B correspondientes a una integral de Coulomb de 5 eV. Electrones con espín (a) hacia arriba y (b) hacia abajo en el sitio A. Electrones con espín (c) hacia arriba y (d) hacia abajo en el sitio B.

Los resultados obtenidos aquí concuerdan con la realidad física en el sentido de que conforme va siendo más fuerte la interacción electrónica coulombiana  $U$  se dividirá la banda de energía apareciendo pequeñas brechas de energía, además de que en la medida que aumenta el valor de la integral de Coulomb  $U$  se presenta una transición de fase magnética que en este caso fue de paramagneto de Pauli a estados antiferrimagnetos. Estos resultados animan a continuar los estudios, extendiéndolos a aleaciones binarias metálicas con parámetros de corto y largo alcance y diferentes concentraciones, para posteriormente poder comparar nuestros resultados con resultados experimentales.

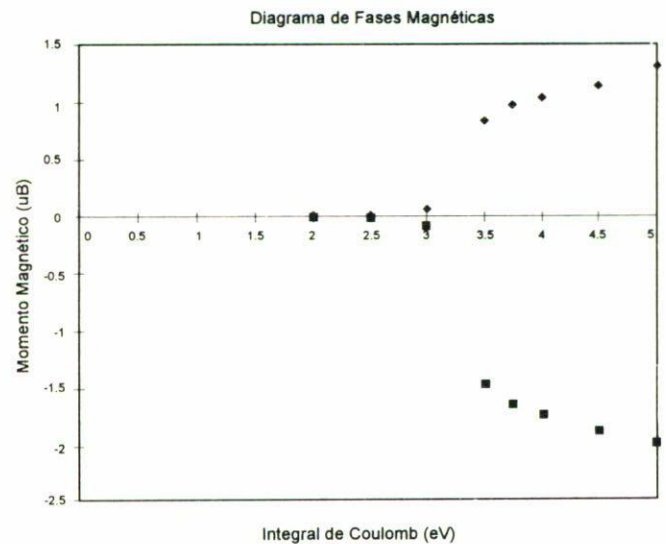


FIGURA 4. Diagrama de fases magnéticas para distintos valores de la integral de Coulomb ( $U$ ),  $\blacklozenge$  Momento magnético del átomo A,  $\blacksquare$  Momento magnético del átomo B.

La teoría permitirá determinar también el efecto que impurezas atómicas tendrán sobre las propiedades magnéticas de sistemas simples. Las propiedades termodinámicas y los diagramas de transición orden-desorden de aleaciones binarias desordenadas podrán también ser determinados mediante el método descrito.

## Agradecimientos

E. López-Chávez agradece al Colegio de Ciencias y Humanidades Plantel (1) Azcapotzalco, al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACYT-México), y al Programa Institucional de Formación de Investigadores del Instituto Politécnico Nacional (PIFI-IPN) por todo el apoyo brindado. Así mismo F.L. Castillo-Alvarado agradece el apoyo de COFAA-IPN, EDD-IPN y de CONACYT.

1. T. Suzuki and Y. Sugita, *Magnetic Materials: Microstructure and Properties*, (MRS, New York, 1991) Vol. 232.
2. K. Mohri *et al.*, *Tech. Digest of 8th. Sensor Symp.* (1989) 235.
3. F.L. Castillo-Alvarado, J. Dorantes-Dávila, and J.L. Morán-López, *Kinam* **8**, Serie C (1987) 127.
4. P. Farkasovsky, *Phys. Rev. B* **57** (1998) 14722.
5. J. Dorantes-Dávila, J.L. Morán-López, and M. Avignon, *Phys. Rev. B* **27** (1983) 575.
6. J.L. Morán-López and L.M. Falicov, *J. Phys. C* **13** (1980) 1715.
7. J.L. Morán-López, K.H. Bennemann, and M. Avignon, *Phys. Rev. B* **23** (1981) 5978.
8. E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, 2nd Edition, (Springer-Verlag, New York, 1990).
9. J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London A* **276** (1963) 238.
10. L.M. Falicov and F. Yndurain, *Phys. Rev.* **B12**, (1975) 5664.
11. F. Gautier, J. Van der Rest, and F. Brouers, *Metal Phys.* **5** (1975) 1884.
12. R.H. Victoria, L.M. Falicov, and S. Ishida, *Phys. Rev. B* **30** (1984) 3896.
13. D.A. Papaconstantopoulos, *Handbook of the Structure of Elemental Solids*, (Plenum, New York, 1986).
14. G.M. Pastor, J. Dorantes-Dávila, and K.H. Bennemann, *Physica B* **149** (1988) 22.
15. A. Vega, L.C. Balbás, J. Dorantes-Dávila, and G.M. Pastor, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 3899.