



IKER  
GAZTE  
NAZIOARTEKO  
IKERKETA EUSKARAZ

# I. IKERGAZTE

NAZIOARTEKO IKERKETA EUSKARAZ

2015eko maiatzaren 13, 14 eta 15  
Durango, Euskal Herria

ANTOLATZAILEA:  
Udako Euskal Unibertsitatea (UEU)

## ZIENTZIA ZEHATZAK ETA NATUR ZIENTZIAK

**2Dko koordinazio sare  
organometalikoaren propietate  
elektroniko eta magnetikoak**

*Iker Gallardo eta Andres Arnau*

401-408 or.

<https://dx.doi.org/10.26876/ikergazte.i.55>

ANTOLATZAILEA:



BABESLEAK:



LAGUNTZAILEAK:



## 2Dko koordinazio sare organometalikoaren propietate elektronikoa eta magnetikoak

Iker Gallardo eta Andres Arnau

*Centro de Física de Materiales CFM, Materials Physics Center MPC, Centro Mixto CSIC-UPV/EHU, P. de Manuel Lardizabal 5, E-20018 San Sebastián, Spain*

*Donostia International Physics Center (DIPC), Paseo de Manuel Lardizabal 4, 20018 San Sebastián/Donostia, Basque Country, Spain*

*Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, Apdo. 1072, 20080 San Sebastián/Donostia, Basque Country, Spain*  
*igallardo007@ikasle.ehu.es*

### **Laburpena**

Lan honetan bi dimentsiotako koordinazio sare organometaliko ezberdinen propietate elektronikoa eta magnetikoak aztertzen dira eta sistemek jasan ditzaketen indarrek propietate magnetikoetan dituzten eraginak ere aztertzen dira. Sare guztietan molekula organikoa tetrazianoetilenoa (TCNE) izango da eta atomo metalikoa 3d seriean banadiotik (V) nikelera (Ni) aldatzen joango da. Bertan ikusiko da, besteak beste, Ni-TCNE sarea ferromagnetikoa dela eta honen arrazoi posiblea emango da eta Co-TCNE sarearen egitura antiferromagnetikotik ferromagnetikorako trantsizioa azalduko da sarea indarren eraginpean jartzen denean.

Hitz gakoak: Sare organometalikoa, Propietate elektromagnetikoak, Egitura magnetikoa

### **Abstract**

*In this work, they have been studied the electronic and magnetic properties of different two dimensional metal-organic coordination networks and the effects of the forces acting on the systems into the magnetic properties. The organic molecule of all the networks is the tetracyanoethylene (TCNE) and the metallic atom goes from the vanadium (V) to nickel (Ni) in the 3d series. In the work, they can be seen that the Ni-TCNE is ferromagnetic and a possible reason for this or the transition of the Co-TCNE from an antiferromagnetic structure to a ferromagnetic structure when it is subjected to forces.*

*Keywords: Metal-organic network, Electromagnetic properties, Magnetic structure*

### **1. Sarrera eta momentuko egoera**

Azken urteetan, dimentsio txikiko sistemen egitura-magnetikoa ulertzen saiatzeko lanen kopurua asko handitu da (Blügel et al., 1988; Blügel et al., 1989; Blügel eta Bihlmayer, 2006; Faraggi et al., 2014; Tseng et al., 2009), baina oraindik ere oso zaila da aurreikustea zein diren egitura magnetikoa eragiten duten elkarrekintzen mota, indarra eta eremua. Honen adibide dira xafla mehe batzuk non propietate magnetikoak erakusten dituzten beraien egituran aldaketa txikiak eginez. Aztertutako sistema kopurua handitzen ari da etengabe, grafenoan eragindako ezpurutasun magnetikoetatik hasita bi dimentsioko sare organometalikoetaraino (Faraggi et al., 2012; Faraggi et al., 2014; Schilickum et al., 2007; Shi et al., 2010; Tseng et al., 2009).

Lan honetan propietate magnetikoak dituzten atomo-geruza bakarreko sare organometalikoak aztertuko dira. Sare organometaliko horiek prestatzeko  $10^{-8}$  Pa baino presio txikiagoan dauden ganberak behar dira. Ganbera horietan molekula organikoak sublimatu egiten dira aurrez prestatutako gainazal batean molekula horietako batzuk atxikitze eta ondoren, atomo metalikoak lurrundu egiten dira molekula organikoen arteko loturak eratzeko. Sarea hezteko metodo honek ekiditen du atomo metalikoen artean loturak sortzea eta, ondorioz, momentu magnetikoak atomo metalikoetan aurkitzen dira eta XMCD (X-ray Magnetic Circular Dichroism) esperimentuetan magnetizazio-kurbak neurtu daitezke (Stepanow et al., 2006).

## 2. Ikerketaren helburuak

Lan honen helburua bi dimentsioko sare organometalikoaren propietate elektronikoen eta magnetikoen azterketa teorikoa modu sistematiko batean egitea da. Sarea 3d mailako trantsizio metalez eta elektroien hartzaile onak den molekula organiko batez, tetrazianoetilenoz edo TCNEz (Wegner et al., 2008), osatua dago. Kalkuluak egiteko orduan, kontuan eduki behar da bi dimentsioko sistemen tenperatura kritikoa solido arruntena baino baxuagoa dela eta honek lortutako emaitzetan eragina izan dezakeela.

## 3. Ikerketaren muina

### 3.1 Oinarri teorikoa

Sistema bidimentsionalen, eta orokorrean, sistema kuantikoen, propietateak kalkulatzeko abiapuntua Schrödingerren ekuazioa da, ondorengoa izanik erabiltzen den Hamiltondarra:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{R_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (1)$$

Hamiltondar honen lehenengo bi terminoak nukleoen eta elektroien energia zinetikoak dira hurrenez hurren. Beste hirurak elektroien eta nukleoen arteko elkarrekintza elektrikotik datoz: hirugarrena elektroien eta nukleoen arteko erakarpen elektrikoa da, laugarrena elektroien desberdinen arteko aldarapena da eta azkenekoa nukleo desberdinen artekoa.

Hamiltondar honekin geratzen den Schrödingerren ekuazioa ezin da analitikoki ebatzi eta hainbat hurbilketa egin behar dira propietateak lortu ahal izateko.

Egiten den lehenengo hurbilketa Born-Oppenheimerren hurbilketa da: Nukleoen masa elektroien baina askoz handiagoa da eta askoz abiadura txikiagoa dute ere; ondorioz, kontsidera daiteke elektroien nukleoen eraginpean potentzial baten eraginpean higitzen direla. Hurbilketa honen eraginez, nukleoen energia zinetikoa arbuatu daiteke eta beraien arteko aldarapena konstantetzat jo daiteke.

Born-Oppenheimerren hurbilketa egin ondoren, Dentsitatearen Funtzionalaren Teoriaren (DFT) oinarriko bi teorema aplikatzen dira: Hohenberg eta Kohn-en teorema. Teorema hauek ezartzen dute hainbat gorputzeko sistemaren oinarriko egoeraren energia (E) karga dentsitatearen ( $\rho(\vec{r})$ ) funtzional bakarria izatea eta hau txikiena izatea benetako sistemaren oinarriko egoerentzako.

Azkenik, Kohn-Shamen hurbilketa egiten da: gure hainbat gorputzeko sistema erraz ebatzi daitekeen elkarrekintzarik gabeko hainbat gorputzeko sistemarekin ordezkatzeko da. Ordezkapen hau egin ahal izateko baldintza bakarra dago; ordezkapenean parte hartu behar duten bi sistemen, elkarrekintzak dauden hainbat gorputzeko sistemaren eta erraz ebatzi daitekeen elkarrekintzarik gabeko hainbat gorputzeko sistemaren, oinarriko egoerak berdinak izatea. Hurbilketa hau egitean, gure problema elkarrekintzarik gabeko hainbat gorputzeko problema ebatzea izango da, problema mota hauen termino guztiekin, truke-korrelazio terminoa barne.

Hurbilketa guztiak egin ondoren, hurrengoa da geratzen den Hamiltondarra:

$$H_{KS} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{XC} + V_{ext} \quad (2)$$

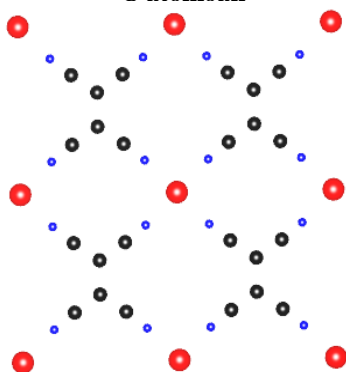
Hamiltondar honetako lehenengo terminoa elektroien energia zinetikoa izaten jarraitzen duelarik,  $\rho$  karga dentsitatea da,  $V_{ext}$  nukleoen eraginpeko potentziala eta  $V_{XC}$  truke-korrelazio funtzionala.

$V_{XC}$  funtzionala eta berari dagokion energia ( $E_{XC}$ ) ez dira ezagunak, eta, ondorioz, problema numerikoki ebatzi behar da ziklo trinko bat erabiliz: hasierako baldintzak (HB) proposatzen dira ekuazioak ebazteko, behin ebatzi ondoren, lortutako emaitzekin (BB), egiaztatzen da hasierako baldintzak egokiak diren edo ez eta egokiak ez direnean beste hasierako baldintza berri batzuk proposatzen dira aurretik proposatutakoetatik (HB) eta emaitzetatik lortutakoetatik (BB) abiatuta.

### 3.2 Sistema

Bi dimentsioko koordinazio-sare organometaliko batzuen propietate elektroniko eta magnetikoak aztertu dira. Bi dimentsioko koordinazio sare organometalikoak atomo metaliko eta molekula organikoz osatutako bi dimentsioko sistemak dira. Aztertutako kasuan, atomo metalikoek sare errektangeluar bat eratzen dute eta molekula organikoak atomo metalikoek osatzen duten laukizuzenen erdian kokatzen direnak. Lan honetan, molekula organiko bezala, tetrazianoetilenoa (TCNE) erabiltzen da elektroi hartzaile ona delako eta atomo metalikoak 3d serieko atomoak erabiltzen dira banadiotik (V) hasita nikelera (Ni) sistemari propietate magnetikoak emateko.

**1. irudia. Aztertutako sistemaren erredua. Atomo gorriak atomo metalikoak dira, urdinak N atomoak eta beltzak C atomoak**



### 3.3 Kalkuluak

Kalkuluak VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) programaren 4.6 bertsioa erabiliz egin dira Kohn-Sham ekuazioak ebazteko.

Lana egiteko, hainbat alditan ioiak erlaxatu behar izan dira; hau da, gela unitatearen barruan, ioi atomikoak mugitzen dira hauek jasaten duten indarra  $0.01\text{eV}/\text{\AA}$  baino txikiagoa izan arte.

**1. taula. Gela unitatearen bektoreen unitateen moduluak eta atomo metalikoaren eta N atomoen arteko lotura distantziak aztertutako sistema guztientzat.**

Sistema	a (Å)	b (Å)	$d_{\text{Me-N}}$ (Å)
V-TCNE	7.52	6.96	2.11
Cr-TCNE	7.29	7.04	2.04
Mn-TCNE	7.43	7.14	2.12
Fe-TCNE	7.27	6.89	2.01
Co-TCNE	7.01	7.31	2.00
Ni-TCNE	7.19	6.94	1.97

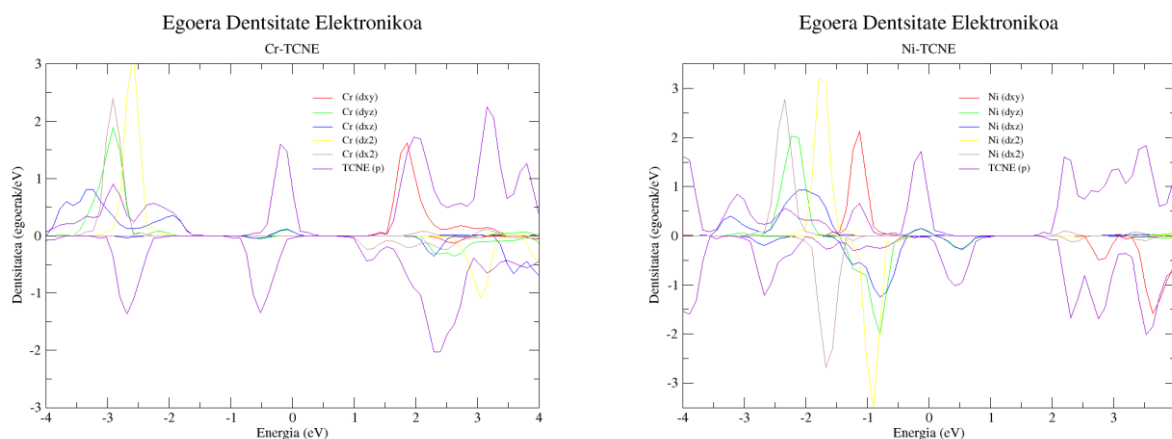
Sistema ezberdinen propietate elektronikoak eta magnetikoak lortzeko, lehenengo pausoa gela-unitatearen bektoreak optimizatu egiten dira bektoreen balio bakoitzerako ioiak erlaxatuz eta sistemaren energia txikiena ematen duten balioak hautatuz. Lortutako balioak 1. taulan agertzen dira balio horientzako atomo metalikoaren eta TCNEko N atomoaren arteko distantziarekin batera.

### 3.4 Emaitzak

#### 3.4.1 Propietate elektronikoak

Propietate elektronikoak aztertzeko asmoarekin sistema guztien elektroien egoera dentsitatearen proiektzioak (2. irudia) lortu dira energia minimoko kalkuluetatik abiatuta.

**2. irudia. Cr-TCNE eta Ni-TCNE sistemen egoera dentsitateen proiektzioak. Proiektzio hauek atomo metalikoaren d orbitalen gainean eta TCNEko p orbitalen gainean egin dira.**



2. irudian falta diren beste sistemak Cr-TCNE sistemaren antzekoak dira. Beste sistemetan aldatzen den gauza bakarra atomo metalikoaren orbital gehiago edo gutxiago daudela Fermi mailatik (0 eV energia) behera, atomo metalikoaren elektroien kopuruaren arabera; hau da, atomo metalikoaren d orbital gehiago edo gutxiago daudela elektroien okupatuta atomo metalikoaren elektroien kopuruaren arabera. Ni-TCNEaren kasua ezberdina da, bertan ikus daiteke TCNEaren LUMO orbitala spinean polarizatuta dagoela. Molekuletan, atomoetan bezala, elektroiak energia maila desberdinetako orbitaletan banatzen, baina orbital molekular hauetan sartu daitezkeen elektroien kopurua aldatzen da orbitalaren energia mailaren eta molekularren atomo mota eta kopuruaren arabera. Molekulak elektroien bat gehiago izango balu elektroien hori LUMO orbitalean egongo litzateke, LUMO orbitala baita hutsik dagoen energia maila baxueneko orbital molekularra. Ni-TCNEan LUMO orbitala spinean polarizatua egoteak esan nahi du TCNEa osatzen duten atomoen p orbitalen spin altuko egoerak Fermi mailatik behera daudela, eta, ondorioz, elektroien beteta daudela; aldiz, spin baxuko egoerak Fermi mailatik gora daude, eta, ondorioz, hutsik aurkitzen dira.

#### 3.4.2 Propietate magnetikoak

2. taulan ikus daitezke kalkuluetatik lortzen diren atomo metalikoaren momentu magnetikoaren balioak. Taula honetan garbi ikus daiteke V-TCNEko V atomoaren momentu magnetikoa  $2.94\mu_B$  dela eta 3d seriean zenbaki atomikoa handitu ahala atomo metalikoaren momentu magnetikoa handitzen doala, Mn-TCNEa iritsi arte, non Mn atomoaren momentu magnetikoa  $4.59\mu_B$  den. Mn-TCNEtik aurrera atomo metalikoaren momentu magnetikoa txikitzen doa  $1.13\mu_B$ -ra iritsi arte Ni-TCNEko Ni atomoan.

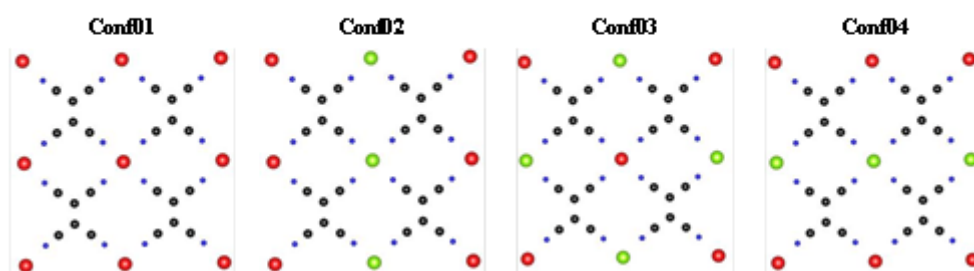
2. taula. Sistema bakoitzaren atomo metalikoaren momentu magnetikoaren balioa.

Sistema	V-TCNE	Cr-TCNE	Mn-TCNE	Fe-TCNE	Co-TCNE	Ni-TCNE
Momentu magnetikoa ( $\mu_B$ )	2.94	3.74	4.59	3.69	2.65	1.13

Momentu magnetikoaren portaera hori honela azal daiteke: 3d seriean aurrera egiten den heinean, atomo metalikoaren 3d orbitalei elektroik bat gehitzen zaie. Momentu magnetikoa lortzeko kontuan eduki behar da atomoaren d orbitaletan spin altuko eta spin baxuko egoerak binaka doazela, spin altuko egoera bat spin baxuko egoera batekin, eta momentu magnetikoa lortzen dela binaka doazen egoera hauetako bakoitzean elektroik bakarra dagoenean. 3d orbitalean elektroikak gehitzen direnean atomo metalikoari momentu magnetikoa gehitzen zaio spin altuko egoerak betetzen doazen bitartean, egoera hauek hutsik baitaude Mn-TCNEra iritsi arte. Mn-TCNEtik Fe-TCNEra pasatzean, sistemari elektroik bat gehitzen jarraitzen zaio, baina elektroik hau spin baxuko egoera batean kokatzen da eta ondorioz, bikoteka ez dauden elektroik kopurua txikitu egiten da momentu magnetikoa txikituz.

Atomo metalikoen momentu magnetikoa lortu ondoren, eta ikusteko aztertutako egitura posibleen artean zein den sistema bakoitzean energia baxuena duen egitura magnetikoa, sistemen gelaxka unitateak bikoiztu dira X eta Y norabideetan 2x2 gelaxka lortuz. 3. irudian agertzen dira aztertutako egitura posible horiek, non atomo beltzak TCNEko C atomoak diren, urdinak N atomoak, gorriak momentu magnetikoaren norabidea spinaren alde positibora dutenak eta berdeak gorrien kontrako norabidea dutenak.

3. irudia. Aztertutako egitura magnetiko posibleak.



3. taulan agertzen dira aztertutako egitura posibleetatik egonkorrena sistema bakoitzerako. Taula honetan ikus daiteke egitura ferromagnetikoa duen sistema bakarra Ni-TCNEa dela. Baita ikus daiteke ere Cr-TCNE eta Mn-TCNE sistemen egitura 3. irudian Conf02 deiturikoa dela eta gainontzekoak Conf03 egitura dutela.

3. taula. Aztertutako egitura posibleen artean egitura egonkorrena Sistema bakoitzarentzako.

Sistema	V-TCNE	Cr-TCNE	Mn-TCNE	Fe-TCNE	Co-TCNE	Ni-TCNE
Egitura egonkorrena	Conf03	Conf02	Conf02	Conf03	Conf03	Conf01

4. taulan ikus daiteke nolakoa den egitura bakoitzaren egonkortasuna, bertan agertzen baita egitura antiferromagnetiko egonkorrenaren eta egitura ferromagnetikoaren arteko energia diferentzia.

**4. taula. Sistema bakoitzerako egitura antiferromagnetiko egonkorrenaren eta egitura ferromagnetikoaren arteko energia diferentzia, meV-tan.**

Sistema	V-TCNE	Cr-TCNE	Mn-TCNE	Fe-TCNE	Co-TCNE	Ni-TCNE
Energia diferentzia (meV)	-287.9	-12.1	-5.2	-7.6	-3.7	45.3

4. taulako energia diferentzietan zeinu positiboak adierazten du egitura ferromagnetiko antiferromagnetikoa baino egonkorragoa dela eta zeinu negatiboak egitura antiferromagnetikoa egonkorragoa dela ferromagnetikoa baino. Taula honetan aipatzekoa da V-TCNE sisteman egitura antiferromagnetikoaren artean eta egitura ferromagnetikoaren artean dagoen energia diferentzia, besteetan baino magnitude ordena bat handiagoa; eta, ondorioz, egitura antiferromagnetiko ezberdinen arteko trantsizioak agertu daitezke, baina oso zaila izango da egitura ferromagnetikora trantsizioa ikustea. V-TCNE eta Ni-TCNE sistemak kenduta, egitura antiferromagnetikoaren eta egitura ferromagnetikoaren arteko lortutako energia diferentzia hauek oso txikiak dira, 15 meV baino txikiagoak, eta, ondorioz, gerta daiteke egitura batetik bestera trantsizioa gertatzea sisteman aldaketa txikiak eginez. Aldaketa horietako bat sistema indarren eraginpean jartzea izan daiteke, eta hau da, hain zuzen ere, egin dena ondorengo atalean.

**3.4.3 Sistemari tentsioa aplikatzearen eraginak**

Mota honetako sistema bidimentsionalen sintesia substratu baten gainean egiten da, non sare organometalikoaren gela-unitatearen bektoreak ez duten substratuaren gainazaleko gela unitatearen bektoreen multiplo osoak izan behar, eta, ondorioz, sare organometalikoan indarrak ager daitezke. Bi metodo ezberdin erabili dira simulatzeko sistemak indar batzuen eraginpean daudela.

Lehenengo metodoan, TCNE molekularako N atomoen eta atomo metalikoen arteko lotura-distantzia %10 handitzen da. Hau egitearen ondorioak 5. taulan ikus daitezke. Taula horretan ikus daiteke V-TCNE eta Fe-TCNEa Conf02 egitura magnetikoa izatera pasatzen direla, Cr-TCNE eta Mn-TCNEa Conf03 egitura eta Ni-TCNEa egitura ferromagnetikoa jarraitzen duela izaten. Co-TCNE sistemaren kasua ezberdina da, Conf03 egitura antiferromagnetikotik Conf01 egitura ferromagnetikora pasatzen baita indarren eraginpean dagoenean.

**5. taula. Sistema bakoitzaren aztertutako egitura magnetiko egonkorrena indarren eraginpean lehenengo metodoaren bitartez.**

Sistema	V-TCNE	Cr-TCNE	Mn-TCNE	Fe-TCNE	Co-TCNE	Ni-TCNE
Egitura egonkorrena	Conf02	Conf03	Conf03	Conf02	Conf01	Conf01

5. taulan ikus daitezkeen bezala, sistema gehienek, indarren eraginpean daudenean, bi egitura antiferromagnetikoen arteko trantsizioa dute edo, Ni-TCNE sistemaren kasuan, ez du inongo trantsiziorik. Baina garrantzitsuena dena da Co-TCNE sistemaren kasua, non egitura antiferromagnetiko batetik egitura ferromagnetikorako trantsizioa dagoen. Trantsizio hauek gertatzen dira elkarrekintza magnetikoak oso ahulak eta egitura kristalinoaren aldaketekiko oso sentikorrek direlako.

Bigarren metodoan gela-unitateko bektoreen moduluak %10 handitzen dira eta ioien posizioak erlaxatu egiten dira. Erlaxazioaren ondorioz, sareko atomoak ez dute indarririk jasaten, baina sistemak jasaten ditu indar batzuk, gela-unitatearen bektoreak ez baitira sistemak nahiago dituenak.

**6. taula. Sistema bakoitzaren azterturiko egitura magnetiko egonkorrena indarren eraginpean bigarren metodoaren bitartez.**

Sistema	V-TCNE	Cr-TCNE	Mn-TCNE	Fe-TCNE	Co-TCNE	Ni-TCNE
Egitura egonkorrena	Conf02	Conf02	Conf02	Conf02	Conf01	Conf01

6. taulan ikus daitekeen bezala, metodo hau aplikatzerakoan, egitura antiferromagnetiko guztiak Conf02 egiturara doaz eta Ni-TCNEa ferromagnetikoa izaten jarraitzen du. Baina taula honetako daturik garrantzitsuena da Co-TCNE sistema, indarren eraginpean dagoenean, egitura antiferromagnetikotik egitura ferromagnetikorako trantsizioaren baieztapena.

#### 4. Ondorioak

Lan honetan azpimarratzeko lehenengo puntua da, dirudienez, Ni-TCNE sistemaren egitura ferromagnetikoa atomo metalikoaren  $d_{xz}$  eta  $d_{yz}$  orbitalen eta TCNE molekularen atomoen  $p_z$  orbitalen arteko hibridazioaren eta TCNE molekularen LUMO orbitalen spin polarizazioaren arteko konbinazioa dela.

Lan honetako beste puntu garrantzitsua indarrek sistemetan dituzten eraginak dira. Azpimarratzekoa da azterturiko egitura antiferromagnetikoen eta ferromagnetikoen arteko energia diferentziak nahiko txikiak direla (meV batzuk kasu gehienetan) eta, ondorioz, sistemetan trantsizioak eragin daitezke indar txikiak aplikatuz. Hau da Co-TCNE sistemaren kasua, indarrik jasaten ez duen bitartean Conf03 egitura antiferromagnetikoa duena, baina indarren eraginpean jartzen denean egitura ferromagnetikoa izatera pasatzen dena. Co-TCNE motako sistemek aurrerapen teknologiko garrantzitsuak ekar ditzakete, sistemaren portaera magnetikoa kontrolatzea ahalbidetzen baitute.

#### 5. Etorkizunerako planteatzen den norabidea

Lan honen ondorengo urratsa azterturako sistemak substratu desberdinen gainean ipintzea izango litzateke, substratuaren gainazalaren eta sare organometalikoaren arteko elkarrekintza nolakoa den eta sareen propietateak nola aldatuko lirakekeen ikusteko helburuarekin. Pausu hau da azterturiko sistemei errealitate fisikoa ematen diena, lehenago aipatu den bezala, sare organometalikoak substratu desberdinetan hezten baitira.

#### 6. Erreferentziak

- Ashcroft, N. W. & Mermin, N. D. (1976). Solid State Physics. *Harcourt, Inc.*, 6277 Sea Harbor Drive, Orlando.
- Blügel, S., & Bihlmayer, G. (2006). Magnetism of Low-dimensional Systems: Theory. *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*.
- Blügel, S., Drittler, B., Zeller, R., & Dederichs, P. H. (1989). Magnetic properties of 3d transition metal monolayers on metal substrates. *Applied Physics A*, 49(6), 547-562.
- Blügel, S., Weinert, M., & Dederichs, P. H. (1988). Ferromagnetism and antiferromagnetism of 3d-metal overlayers on metals. *Physical review letters*, 60(11), 1077.
- Cottenier, S. (2004). Density Functional Theory and the Family of (L) APW-methods: a step-by-step introduction. *KU Leuven, Belgium: Instituut voor Kern-en Stralingsfysica*.
- Dudarev, S. L., Botton, G. A., Savrasov, S. Y., Humphreys, C. J., & Sutton, A. P. (1998). Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+ U study. *Physical Review B*, 57(3), 1505.



- Faraggi, M. N., Golovach, V. N., Stepanow, S., Tseng, T. C., Abdurakhmanova, N., Kley, C. S., ... & Arnau, A. (2014). Modelling Ferro-and Antiferromagnetic Interactions in Metal-Organic Coordination Networks. *The Journal of Physical Chemistry C*.
- Faraggi, M. N., Jiang, N., Gonzalez-Lakunza, N., Langner, A., Stepanow, S., Kern, K., & Arnau, A. (2012). Bonding and charge transfer in metal-organic coordination networks on Au (111) with strong acceptor molecules. *The Journal of Physical Chemistry C*, 116(46), 24558-24565.
- Gallardo, I. & Arnau, A. (2014). Electronic and magnetic properties of 2-D metal-organic coordination networks. *Masterreko Tesia*.
- Martin, R. M. (2004). Electronic structure: basic theory and practical methods. *Cambridge university press*.
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865.
- Schlickum, U., Decker, R., Klappenberger, F., Zoppellaro, G., Klyatskaya, S., Ruben, M., ... & Barth, J. V. (2007). Metal-organic honeycomb nanomeshes with tunable cavity size. *Nano letters*, 7(12), 3813-3817.
- Shi, X. Q., Lin, C., Minot, C., Tseng, T. C., Tait, S. L., Lin, N., ... & Van Hove, M. A. (2010). Structural Analysis and Electronic Properties of Negatively Charged TCNQ: 2D Networks of (TCNQ) 2Mn Assembled on Cu (100). *The Journal of Physical Chemistry C*, 114(40), 17197-17204.
- Stepanow, S., Lin, N., Barth, J. V., & Kern, K. (2006). Surface-template assembly of two-dimensional metal-organic coordination networks. *The Journal of Physical Chemistry B*, 110(46), 23472-23477.
- Stepanow, S., Lin, N., Barth, J. V., & Kern, K. (2006). Surface-template assembly of two-dimensional metal-organic coordination networks. *The Journal of Physical Chemistry B*, 110(46), 23472-23477.
- Wegner, D., Yamachika, R., Wang, Y., Brar, V. W., Bartlett, B. M., Long, J. R., & Crommie, M. F. (2008). Single-molecule charge transfer and bonding at an organic/inorganic interface: Tetracyanoethylene on noble metals. *Nano letters*, 8(1), 131-135.

## 7. Eskerrak eta oharrak

Marisa Faraggiri eta Ane Sarasolari eskerrak eman nahi nizkieke lan honen hasieran eman zidaten laguntzagatik eta Materialen Fisika Zentroari (MFZ), Donostia International Physics Centerri (DIPC) eta Euskal Herriko Unibertsitateari (EHU) lan hau aurrera eraman ahal izateko eman duten jarri dituzten baliabide ekonomiko eta teknikoengatik.

Beste aldetik, lan hau nire masterreko tesitik eratorria da eta bertako emaitza batzuetaz baliatu ahal izan naiz lan hau egiteko orduan.