

Propiedades termomagnéticas de un ferrimagneto de Ising mixto

Thermomagnetic properties of a ferrimagneto mixed Ising

Jose A. Reyes P^{1.}, Nicolás. De La Espriella V.^{1*}

Recibido: Enero 17 de 2014 - Aceptado: Abril 22 de 2014

Resumen

Estudiamos las propiedades termomagnéticas de un sistema de Ising ferrimagnético con espines mixtos $S_i^A = \pm 3/2, \pm 1/2$ y $\sigma_i^B = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$, mediante simulaciones Monte Carlo. Los espines están alternados sobre una red cuadrada, tal que las interacciones a primeros vecinos ocurren entre espines distintos ($S \leftrightarrow \sigma$). Investigamos los efectos de los campos cristalinos D_A y D_B , y del campo magnético externo h , sobre las temperaturas crítica (T_c) y de compensación (T_{comp}) del sistema. Para $h = 0$ el sistema experimenta transiciones de fase de segundo orden y T_{comp} para un rango determinado de los parámetros del Hamiltoniano. Para $h < 0$ se presentan transiciones de fase de primer orden y no hay T_{comp} .

Palabras clave: Sistema Ising, temperaturas críticas, temperaturas de compensación, campo cristalino, campo magnético.

Abstract

We have studied the thermomagnetic properties of a ferrimagnetic Ising system with mixed spins $S_i^A = \pm 3/2, \pm 1/2$ and $\sigma_i^B = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$, by using Monte Carlo simulations. The spins are alternated on the square lattice, such that nearest neighbor interactions occur between different spins ($S \leftrightarrow \sigma$). We investigate the effects of the crystal fields D_A and D_B , and of magnetic field h , on the critical and compensation temperatures of the system. For $h = 0$ the system presents phase transitions of second order and compensation temperatures in a certain range of parameters of Hamiltonian. For $h < 0$ the system undergo phase transitions of first order and was not found T_{comp} .

Keywords: Ising system, critical temperatures, compensation temperatures, crystal field, magnetic field.

¹Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Córdoba. Carrera 6 N° 76-103, Montería, Colombia. *Autor a quien debe dirigirse la correspondencia: ndelae52@gmail.com

Introducción

Entre las generalizaciones del modelo de Ising que se han empleado para el estudio del magnetismo, se encuentra el modelo de Ising de espines mixtos, usado en la actualidad no sólo para estudios puramente teóricos, sino también, que se han propuesto como posibles sistemas para describir materiales ferrimagnéticos, que se han estudiado experimentalmente [1,2,3]. Los modelos de Ising de espines mixtos se emplean como una herramienta valiosa para la comprensión de las propiedades termomagnéticas de muchos compuestos moleculares, debido a que a través de ellos se pueden calcular exactamente cantidades físicas observables; por ejemplo, el estudio teórico de las propiedades magnéticas de superconductores de óxido de cobre, y la comprensión de materiales magnéticos basados en moléculas bimetalicas [4,5,6]. Recientemente el interés por estudiar las propiedades termomagnéticas de materiales nanoestructurados, tales como nanopartículas, nanocintas, nanotubos y nanocables, ha crecido notablemente debido a su reducido tamaño y múltiples posibilidades de aplicación en nanotecnologías. Entre estas nanoestructuras se encuentran memorias magnéticas de alta densidad, sensores, dispositivos de imágenes moleculares, nanopartículas ferroeléctricas y nanopartículas como $\text{La}_0.7\text{Ca}_0.33\text{Mn}_3$ (LCMN) [7,8] que han sido estudiadas utilizando el modelo de Ising de espines mixtos. Es por esto que el modelo se ha convertido en un excelente "laboratorio" para la comprensión de estos sistemas complejos [9,10].

En los últimos años se han realizado diversos trabajos teóricos usando el modelo de Ising mixto para el estudio de sistemas ferrimagnéticos, ya que hay una posibilidad interesante de la existencia de una temperatura de compensación, T_{comp} , bajo ciertas condiciones, en la que la magnetización total se anula [11]. Estudios previos basados en técnicas de Monte Carlo indican que para que se presente el fenómeno

de la compensación de las subredes deben existir al menos dos interacciones fundamentales de diferentes naturalezas, una que favorezca el ferrimagnetismo y otra ferromagnética a segundos vecinos que ayude al balance del orden magnético entre las subredes [12].

Este fenómeno juega un papel fundamental en las investigaciones tecnológicas, ya que a $T = T_{\text{comp}}$ sólo es necesario un pequeño campo magnético para invertir la magnetización neta, lo cual es ideal para los procesos de registro magneto-óptico [13,14,15].

Hoy en día la comprensión del magnetismo es todavía una tarea difícil que requiere elementos de los diversos campos de la física. Por ejemplo, la comprensión de la anisotropía magnética en los magnetos moleculares, la cual es de gran importancia para muchas aplicaciones tecnológicas. Una forma alternativa para tratar de resolver estas limitaciones, es el uso de las computadoras, las cuales han permitido la implementación de modelos mucho más complejos donde se realizan los cálculos necesarios.

Una de las técnicas computacionales más útiles para estudiar las propiedades termomagnéticas de sistemas magnéticos, es el método de Monte Carlo, en donde los procesos estadísticos están controlados por medio de la generación de números aleatorios [16]. Trabajos previos empleando este método, han reportado propiedades termomagnéticas de estructuras cristalinas formadas por dos o más subredes de espines mixtos de Ising [17,18,19,20].

En este trabajo se estudian las propiedades termomagnéticas del modelo ferrimagnético de Ising mixto de espines $S_i^A = 3/2$ y $S_j^B = 5/2$, con interacción a primeros vecinos, interacciones de campo cristalino e interacción con un campo magnético externo, usando técnicas de simulación numérica por métodos de Monte Carlo y un algoritmo tipo baño térmico [21].

Materiales y Métodos

El modelo estudiado es un ferrimagneto de Ising mixto con espines 3/2 y 5/2, alternados en una red cuadrada de lado $L = 80$. El Hamiltoniano de interacción del sistema se define como:

$$H = -J_{AB} \sum_{i,j \in (n,n)} S_i^A \sigma_j^B - D_A \sum_{i \in A} (S_i^A)^2 - D_B \sum_{j \in B} (\sigma_j^B)^2 - h \sum_{i \in A} S_i^A - h \sum_{j \in B} \sigma_j^B \quad (1)$$

donde $S_i^A = \pm 3/2, \pm 1/2$ y $\sigma_j^B = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ son los espines sobre las subredes A y B respectivamente. J_{AB} representa la interacción de intercambio entre pares de espines a primeros vecinos, D_A y D_B son los campos cristalinos de cada subred, generadores de las anisotropías del sistema y h es un campo magnético externo. La primera suma se efectúa sobre todos los pares de espines con interacción a primeros vecinos, es decir, entre los sitios con espines $S_i^A = 3/2$ y $\sigma_j^B = 5/2$, las sumas Σ_i y Σ_j se realizan sobre todos los sitios de espines de las subredes A y B , respectivamente y las dos últimas sumas representan la interacción del campo magnético externo sobre las dos subredes. Escogemos un acoplamiento ferrimagnético a primeros vecinos, $J_{AB} < 0$, y adoptamos condiciones de borde periódicas. Todas las variables en el Hamiltoniano están en unidades de energía.

La simulación del modelo, descrito por la ecuación (1), se lleva a cabo mediante el método de Monte Carlo, generando los estados aleatoriamente mediante un algoritmo tipo baño térmico. Se elige un espín al azar, y se calcula la diferencia de energía ΔE_{ij} y la probabilidad de transición $\exp(-\beta \Delta E_{ij})$, asociada a cada uno de los posibles cambios. Luego, se considera si el espín cambia su valor, generando un número aleatorio \mathfrak{R} , en el intervalo $(0, \Sigma P_i)$, donde ΣP_i , representa la suma de las probabilidades de transición. Los datos se generan con 50.000 pasos de Monte Carlo por sitio, después de descartar los primeros 10.000 pasos por sitio para alcanzar el equilibrio del sistema. El cálculo de errores se estima usando el método de

bloques, donde se divide la muestra de tamaño L en n_b bloques de longitud $L_b = L/n_b$. Cuando L_b es mayor que la longitud de correlación, los promedios de los bloques se pueden considerar estadísticamente independientes. De esta forma, los errores se calculan tomando los promedios de los bloques en vez de las mediciones originales. Las barras de error se calculan agrupando todas las medidas en 10 bloques y tomando su desviación estándar [15].

Las magnetizaciones por sitio de las subredes (M_A, M_B), y la magnetización total por espín, M_T , se definen como:

$$M_A = \frac{2}{L^2} \langle \sum_i S_i^A \rangle \quad (2)$$

$$M_B = \frac{2}{L^2} \langle \sum_j \sigma_j^B \rangle \quad (3)$$

$$M_T = \frac{M_A + M_B}{2} \quad (4)$$

Definiendo $\beta = 1/k_B T$, se calcula el calor específico por sitio, C , mediante la expresión:

$$C = \frac{\beta^2}{L^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) \quad (5)$$

Resultados - discusión

Efecto del campo cristalino D_A

En esta sección se estudia el efecto del campo cristalino D_A sobre el comportamiento de M_T , C , T_c y T_{comp} del sistema en ausencia del campo magnético externo. Fijaremos el campo cristalino $D_B = -1.94$ y variaremos el campo D_A . En la figura 1 se muestra el fenómeno de compensación, a través de la magnetización total en función de la temperatura, para diversos valores del campo cristalino D_A . El punto de compensación se presenta para $T < T_c$ en todas las curvas de M_T . En $T = 0$, la magnetización total es cero para todos los valores del campo cristalino D_A , y con el incremento de la temperatura, las curvas de magnetización crecen hasta llegar a un máximo, para luego decrecer a cero en $T = T_{comp}$. Después

del segundo máximo, M_T cae abruptamente a cero en $T = T_c$, presentándose una transición de fase de segundo orden que separa la fase ferrimagnética de la paramagnética ($T > T_c$). Al aumentar el campo cristalino, T_c aumenta, mientras que T_{comp} disminuye, es decir, las magnetizaciones de las subredes se compensan a temperaturas más bajas a medida que el campo D_A crece.

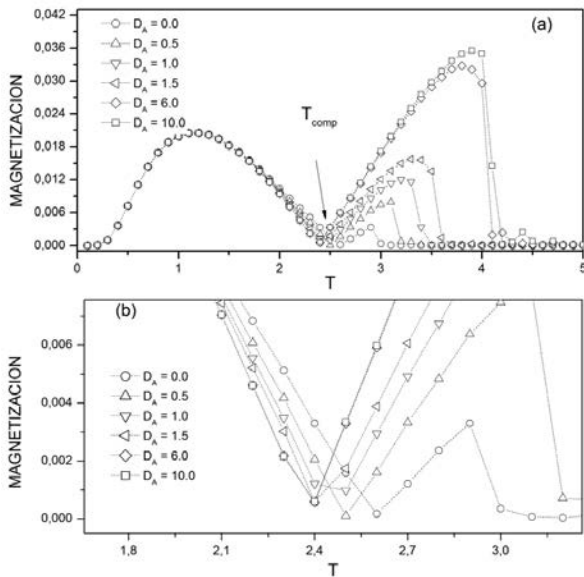


Figura 1. (a) Magnetización total en función de la temperatura. $D_B = -1.94$, $D_A > 0$, $J_{AB} < 0$. (b) Ampliación de la región donde se presenta T_{comp} .

Con los máximos de las curvas de calor específico podemos calcular las temperaturas críticas y analizar su dependencia con el campo cristalino D_A . Se observa en la figura 2 las curvas del calor específico del sistema para valores positivos D_A . T_c se incrementa al incrementar D_A . Cuando $D_A > 0$, surge un segundo pico no crítico a temperaturas bajas, producto del intento de los espines a reorganizarse térmicamente por el efecto del campo cristalino.

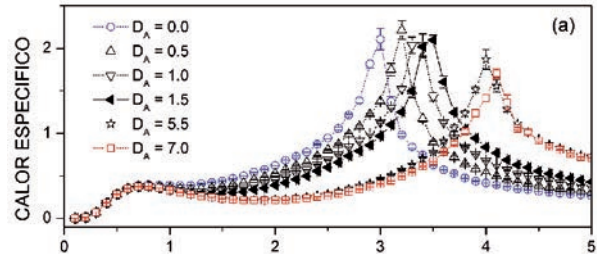


Figura 2. Calor específico por espín en función de la temperatura. En $D_A > 0$, $D_B = -1.94$, $J_{AB} < 0$.

Efecto de un campo magnético externo h

A continuación estudiaremos las propiedades termomagnéticas del modelo en presencia de un campo magnético externo h , con D_B fijo y D_A variable. La variación térmica de la magnetización total para $D_B = -1.94$, $D_A > 0$ y $h = 1$ se muestra en la figura 3(a), y para $h = 0$, en la figura 3(b). En presencia de h , M_T aumenta su valor continuamente desde cero, en $T = 0$; hasta llegar a un máximo y luego disminuir lentamente a una magnetización aproximadamente constante. Por otra parte, los máximos de las magnetizaciones aumentan al incrementarse el campo cristalino D_A . Vale la pena resaltar, que para $h > 0$ no se presenta temperatura de compensación y la transición de fase de segundo orden desaparece; es decir, el efecto del campo externo destruye la transición de fase.

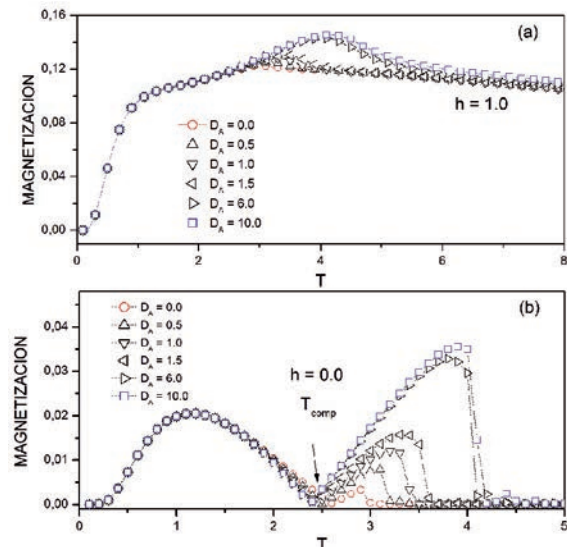


Figura 3. Magnetización total por espín en función de la temperatura. En (a) $h = 1$ y en (b) $h = 0$. $D_B = -1.94$, $J_{AB} < 0$.

El caso particular ($D_A = 1.5$) se muestra en la figura 4, donde el efecto de $h > 0$ sobre el sistema, elimina la temperatura de compensación que se presentaba para $h = 0$.

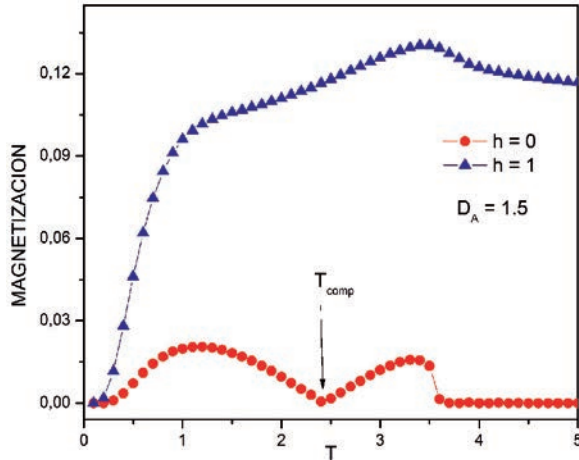


Figura 4. Magnetización total por espín en función de la temperatura. $h = 1$ y $h = 0$, $D_A = -1.5$. $D_B = -1.94$, $J_{AB} < 0$.

Las figuras 5(a) y 5(b) muestran la dependencia del calor específico con la temperatura, en ausencia y en presencia de h , respectivamente. Al comparar las gráficas observamos que para $h > 0$ los picos de las curvas del calor específico se suavizan, lo cual indica que la temperatura crítica no se presenta en el sistema, producto del ordenamiento de los espines de cada subred.

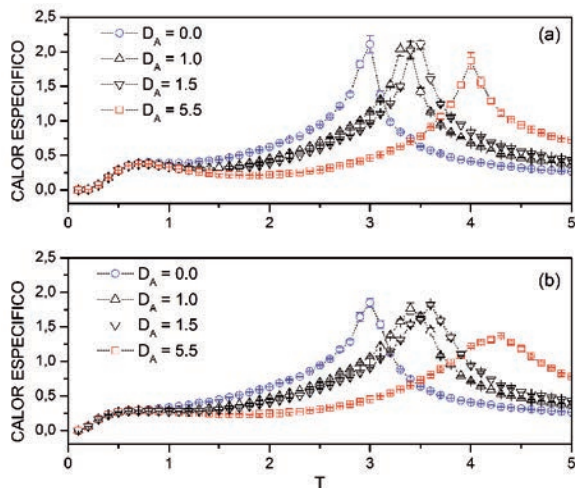


Figura 5. Calor específico por espín en función de la temperatura. En (a) $h = 0$ y en (b) $h = 1$. $D_B = -1.94$, $J_{AB} < 0$.

La figura 6(a) detalla los efectos del campo D_A en presencia de un campo magnético externo negativo ($h = -1$) y $D_B = -1.94$. Al igual que para $h = 0$ (figura 6(b)), M_T se incrementa desde cero con el incremento de la temperatura, hasta llegar a un primer máximo aproximadamente en $T \approx 1.2$, para todos los valores de D_A . Al aumentar T , M_T decrece hasta un valor mínimo y posteriormente se incrementa de forma abrupta presentándose transiciones de fase de primer orden, que es más apreciable para los valores mayores de D_A .

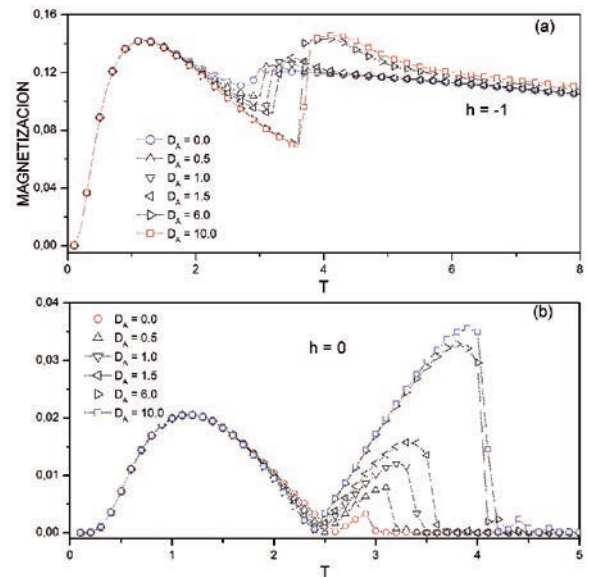


Figura 6. Magnetización total por espín en función de la temperatura. En (a) $h < 0$ y en (b) $h = 0$. $D_B = -1.94$, $J_{AB} < 0$.

Conclusiones

En el presente artículo investigamos el comportamiento crítico de un ferrimagneto de Ising de espines mixtos $S_i^A = \pm 3/2, \pm 1/2$ y $\sigma_i^B = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ sobre una red cuadrada, con interacciones a primeros, interacciones de los campos cristalinos $D_A D_B$ e interacción de un campo magnético externo h . En ausencia de h , el sistema presenta T_c y T_{comp} para diversos valores del parámetro D_A y D_B fijo. Se encontró que al incrementar el campo cristalino D_A , T_c aumenta, mientras que T_{comp} decrece, y al exponer el sistema a un campo magnético externo, la transición de

fase de segundo orden desaparece al igual que las temperaturas de compensación, es decir, el efecto del campo externo destruye la transición de fase y no se produce compensación de las subredes y el sistema experimenta transiciones de fase de primer orden, reflejadas en la discontinuidad de la magnetización.

Bibliografía

- [1] Benayad N and Ghliyem M. *Physica B*, 407:6, (2012).
- [2] Zaim A., Kerouad M. and Belmamoun Y. *Physica B*. 404:2280, (2009).
- [3] Htoutou K., Ainane A. and Saber M. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 269:245, (2004).
- [4] Padilha I., Ricardo J., Neto M., Salmon O. and Viana J. *Physica A*, 392:4897, (2013).
- [5] Liang Y., Wei G. and Song G. *Physica A*, 387:4513, (2008).
- [6] Denise A., Minos A., Ricardo J. and Pacobahyba J. *Physica A*, 392:5313–5321, (2013).
- [7] Irzhak A., Koledov V., Zakharov D., Lebedev G., Mashirov A., Afonina V., Akatyeva K., Kalashnikov V., Sitnikov N., Tabachkova N., Shelyakov A. and Shavrov V. *Journal of Alloys and Compounds*, 586:S464, (2014).
- [8] Zaim A. and Kerouad M. *Physica A*, 389:3435, (2010).
- [9] Kaneyoshi T. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321:3430, (2009).
- [10] Kaneyoshi T. *Physica A*, 391:3616, (2012).
- [11] Aysegül Ö. And Ümüt T. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 330:55, (2013).
- [12] Buendía G. and Novotny M. J. *Phys.: Condens. Matter*, 9:5951, (1997).
- [13] Mohamad H. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 323:61–66, (2011).
- [14] Deviren B., Keskin M. and Canko O. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321:458-466, (2009).
- [15] Xu C. and Yan S. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 345:261, (2013).
- [16] Newman M. and Barkema G. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press-Oxford, (2006).
- [17] Deviren B. and Keskin M. *Journal of Statistical Physics*, 140:934, (2010).
- [18] De La Espriella N. and Buendía G. *Physica A*, 389: 2775, (2010).
- [19] De La Espriella N. and Buendía G. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23: 176003, (2011).
- [20] Buendía G. and Villarroel J. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 310:E495, (2007).
- [21] Toral R. . *Computational Field Theory and Pattern Formation*, en *Third Granada Lectures in Computational Physics Proceedings*, Granada (Spain). P. L. Garrido y J. Marro, eds. Springer Lecture Notes in Physics, 448, (1994).