

# Diagramas de Fase a Temperatura Finita de un Ferromagneto de Momentos Magnéticos $S = 3$ y $Q = 1$

Presentado por:

**Luis David Padilla Doria**



Universidad de Córdoba

Facultad de Ciencias Básicas

Departamento de Física y Electrónica

Montería, Colombia

2020

**Diagramas de Fase a Temperatura Finita de un Ferromagneto de  
Momentos Magnéticos  $S = 3$  y  $Q = 1$**

**Luis David Padilla Doria**

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:  
**Físico**

Director:

**Dr. Nicolás Antonio De La Espriella Vélez.**

Línea de investigación:

**Simulación Computacional de Sistemas Magnéticos**

Grupo de Investigación:

**GAMASCO**

Universidad de Córdoba

Facultad de Ciencias Básicas

Departamento de Física y electrónica

Montería, Colombia

2020

## **Agradecimientos**

A Dios que está sobre todas las cosas.

A mi familia, en especial mis padres por ser los maestros de mi vida, porque me enseñaron los valores y virtudes que debía aplicar en todos los campos, y perspectivas de la sociedad en general.

A mi director el Dr. Nicolás Antonio De La Espriella Vélez por aceptarme como su alumno del trabajo de grado en Física.

Agradezco mucho a todos los docentes, compañeros, cuerpo administrativo y trabajadores que me acompañaron en este camino y que aportaron su experiencia, su conocimiento para mi formación.

A la facultad de Ciencias Básicas por brindarme los conocimientos necesarios para obtener mi título universitario.

Deseo agradecer a la Universidad de Córdoba por presentarme todos los medios, para llevar a cabo la realización de mi carrera, es decir, por ser la Institución que me ha formado.

# Índice general

<b>1. Introducción .....</b>	<b>1</b>
<b>2. Magnetismo y estructura de modelos magnéticos .....</b>	<b>3</b>
2.1. Origen del Magnetismo.....	4
2.2. Estructuras Magnéticas .....	5
2.2.1 Ferromagnetismo .....	5
2.2.1.1. Fundamentos físicos del ferromagnetismo .....	6
2.2.2. Antiferromagnetismo.....	8
2.2.3. Ferrimagnetismo .....	8
2.3 Mecánica estadística en el estudio de los materiales magnéticos .....	8
2.4 El Modelo Ising.....	9
2.4.1. El modelo Ising en dos dimensiones .....	11
2.5 Transiciones de fase .....	12
2.5.1. Ejemplo de transiciones de fase.....	12
2.5.2 Transiciones de fase del modelo Ising ferromagnético .....	13
2.6 Simulaciones computacionales en equilibrio térmico.....	14
2.6.1 Simulación Monte Carlo.....	15
2.6.2 Aspectos importantes de la Simulación Monte Carlo .....	15
2.6.2.1 Muestreo de importancia.....	15
2.6.2.2 Proceso de Markov .....	16
2.6.2.2.1 Ergodicidad .....	16
2.6.2.2.2 Balance detallado .....	16
2.7 Algoritmo Metropolis .....	17
2.8 Cálculo de errores .....	18
2.9 Algoritmo para sistemas mixtos de Ising .....	18
<b>3. Resultados y análisis.....</b>	<b>20</b>
3.1. Hamiltoniano de interacción .....	20
3.2. Variables termomagnéticas del modelo .....	20
3.3. Efecto del campo magnético $h$ sobre las variables termodinámicas .....	21
3.3.1. Efecto de $h$ sobre la energía $E$ .....	21
3.3.2. Efecto de $h$ sobre el calor específico $C$ .....	23

3.3.3. Efecto de $h$ sobre las magnetizaciones $M_S$ , $M_Q$ y $M_T$ .....	26
3.3.4 efecto de $h$ sobre la susceptibilidad magnética $X_T$ .....	31
<b>4. Conclusiones</b> .....	34
<b>Referencias Bibliográficas</b> .....	35

## Índice de figuras

2.1 Representación clásica del momento magnético .....	4
2.2 Representación esquemática del ordenamiento de los momentos magnéticos en una estructura ferromagnética. ....	7
2.3 Alineación de los momentos dipolares magnéticos en materiales antiferromagnéticos ..	8
2.4 Alineación de los momentos dipolares magnéticos en materiales ferrimagnéticos. ....	9
2.5 Modelo Ising bidimensional. ....	12
2.6 (a) Diagramas de fase de un ferromagneto. (b) Dependencia con el campo de la energía libre. (c) Dependencia con el campo de la magnetización. (d) Dependencia con el campo de la susceptibilidad. (e) Dependencia de la magnetización con la temperatura. (f) Dependencia de la susceptibilidad con la temperatura. ....	14
3.1 Energía por espín en función de la temperatura para diversos valores de $h$ , con $J_1 = 1$ , $D_S = -0.5$ y $D_Q = 4$ .....	21
3.2 Energía por espín en función de la temperatura para diversos valores de $h$ , con $J_1 = 1$ , $D_S = -0.5$ y $D_Q = 4$ .....	22
3.3 Energía por espín en función de la temperatura para diversos valores de $h$ , con $J_1 = 1$ , $D_S = -0.5$ y $D_Q = 4$ .....	22
3.4 Energía de estado base $E_0$ en función del campo magnético $h$ , con $J_1 = 1$ , $D_S = -0.5$ y $D_Q = 4$ . $E_{0L}$ representa la linealización de la curva $E_0$ .....	23
3.5 Calor específico en función de la temperatura para diferentes valores de campos magnéticos positivos. ....	24
3.6 Calor específico en función de la temperatura, para diferentes valores de campos magnéticos positivos. ....	24
3.7 Calor específico en función de la temperatura, para diferentes valores de campos magnéticos negativos. ....	25
3.8 Calor específico en función de la temperatura, para diferentes valores de campos magnéticos negativos. ....	25
3.9 Comportamiento de la magnetización por espín de las subredes $M_S$ y $M_Q$ y la magnetización total por espín $M_T$ . ....	27
3.10 Dependencia de la magnetización total por espín con la temperatura para varios valores negativos de campo magnético $h$ (incluyendo $h=0$ ). ....	28
3.11 Dependencia de la magnetización total por espín con la temperatura para varios valores positivos de campo magnético $h$ (incluyendo $h=0$ ). ....	28

3.12 Comportamiento de la magnetización por espín de las subred <b>A</b> para $D_s = -0.5$ con variaciones en el campo magnético $h$ .....	30
3.13 Comportamiento de la magnetización por espín de las subred <b>B</b> para $D_Q = 4$ con variaciones en el campo magnético $h$ .....	30
3.14 Dependencia de la susceptibilidad magnética por espín con el campo magnético longitudinal externo.....	31
3.15 Dependencia de la susceptibilidad magnética por espín con el campo magnético longitudinal externo de valores $h = 1$ y $h = -1$ .....	32
3.16 Dependencia de la temperatura crítica del sistema respecto a la variacion del campo magnético aplicado.....	33

## Resumen

En este trabajo investigamos el comportamiento termomagnético de un sistema ferromagnético tipo Ising de espines  $S = 3$  y  $Q = 1$  configurados en una red cuadrada bipartita de subredes  $A$  y  $B$ . Se espera medir el efecto del campo externo  $h$  sobre propiedades del sistema a temperatura finita de la energía, las magnetizaciones, el calor específico y la susceptibilidad magnética total por sitio de red, usando simulaciones Monte Carlo. El Hamiltoniano que define al sistema tiene interacciones de intercambio a primeros vecinos ( $J_1$ ), de campos cristalinos  $D_S$  y  $D_Q$  y un campo magnético externo  $h$ . Se halló que la temperatura crítica es proporcional al incremento del campo magnético externo. A bajas temperaturas el sistema presenta picos no críticos debido al reordenamiento de los espines en las subredes por efectos de los campos cristalinos dados en el Hamiltoniano de interacción. Con los efectos del campo magnético externo sobre la susceptibilidad magnética, el sistema aumento gradualmente con el incremento de la temperatura, por otra parte, se encontró que la energía de estado base del modelo decrece con el incremento del campo magnético externo. Por otra parte, la aplicabilidad de esta investigación aún no ha sido encontrada posiblemente por que no exista en la naturaleza la presencia de un compuesto que represente la configuración de momentos magnéticos escogidos.

# Capítulo 1

## Introducción

Para discutir sobre magnetismo y sus fenómenos evidenciados en la naturaleza, se pudo comprobar en base a las investigaciones previas que permitieron la comprensión teórica. En el extenso campo del magnetismo que ha dado aportes grandes a la humanidad, este ha sido la cuota de partida para la creación y desarrollo de innumerables dispositivos tecnológicos que nos permiten realizar las actividades de una manera rápida y más eficaz, para tener una perspectiva de un entorno más agradable.

En la actualidad las tendencias del futuro en el ambiente tecnológico e industrial radican en el diseño y síntesis de materiales magnéticos, donde muchos de los mayores esfuerzos e investigaciones están encaminados a la fabricación controlada y los métodos de caracterización de sistemas magnéticos a escala atómica o nanométrica. En las últimas décadas se puede apreciar el incremento del estudio, y por ende la extensión, de los llamados materiales nanoestructurados, ya que estos presentan propiedades que son diferentes a las que muestra el material en forma masiva; así mismo, se encuentran por una parte nuevas perspectivas tecnológicas e innovadoras en las que podemos resaltar el aporte del científico alemán Peter Grünberg quien recibió premio Nobel de física en 2007 por el descubrimiento de la magnetoresistencia gigante [1], resonadores magnéticos con una notoria aplicabilidad en el campo de la salud [2], lo que condujo al avance tecnológico con el cual contamos en la actualidad y por otra parte se ponen de manifiesto nuevos fenómenos magnéticos, dependiendo de la condicionalidad que se asuma.

Dentro de las complejas estructuras magnéticamente ordenadas, de acuerdo con la orientación de sus momentos magnéticos, están los ferromagnetos. Son materiales con una orientación en sus átomos que favorece la interacción entre los dipolos magnéticos que están alineados al interior de los dominios magnéticos de la configuración ferromagnética.

El fenómeno del ferromagnetismo fue mejor comprendido cuando las interacciones de intercambio entre las partículas constituyentes dentro del material ferromagnético fueron conocidas a través de los estudios de Heisenberg [3]. Sobre la base de estas investigaciones preliminares se estudiaron algunas propiedades de las sustancias ferromagnéticas, cuyos resultados no estaban de acuerdo con lo presentado a nivel experimental [4]. Más tarde, Kuz'min propone una fórmula empírica para la caracterización magnética de los sistemas ferromagnéticos y establece un enfoque más preciso entre los estudios teóricos y experimentales [5]. En vista de lo que planteo anteriormente y del progreso de la investigación en el campo del magnetismo, pudimos notar que en el análisis termomagnético de los sistemas magnéticos reales ha tenido un auge espectacular gracias al desarrollo de los modelos de espín como recurso teórico durante muchos años últimamente. Dentro de estos modelos encontramos los de Ising, ya que han demostrado ser efectivos para el análisis del

comportamiento magnético de redes cristalinas y se han empleado eficazmente para caracterizar diversas estructuras magnéticas, como los ferromagnetos, antiferromagnetos y ferrimagnetos, que presentan una diversidad de fenómenos magnéticos entre los que se destacan los comportamientos de histéresis [6], transiciones de fase de primer orden [7], fenómenos reentrantes [8][9], campo magnético-coercitivo y magnetización remanente [10], así como también superparamagnetismo [11][12], entre otros.

Por otra parte, hay importantes estudios sobre estructuras y acoplamientos ferromagnéticos tales como el trabajo de Sarlı *et al* sobre las propiedades de magnetización e histéresis de la nanoestructura de tricapa ferromagnética de Ising [13], las investigaciones de M'nassri sobre el análisis magnetocalórico en la manganita  $Pr_{0.4}Eu_{0.2}Sr_{0.4}MnO_3$  [14] y el análisis crítico del ferromagneto Ising en las redes fcc, hcp y dhcp [15]. Cabe señalar que muchos de estos materiales presentan transiciones de fase de primer orden causadas por inversiones repentinas de la magnetización, fenómeno este de gran interés práctico para la manipulación y el almacenamiento de información magnética [16].

Utilizando nuevas técnicas como la teoría de campo efectivo se pudieron obtener una cantidad apreciable de fenómenos físicos interesantes [17], destacándose el trabajo de Temizer *et al* a través de la dinámica estocástica de Glauber, cuando encontraron magnetizaciones dinámicas y temperaturas de compensación [18]. Por otra parte, Keskin *et al* utilizando aproximaciones de campo medio para un sistema meta-magnético obtuvieron transiciones de fase dinámica con cálculos Monte Carlo, argumentando su precisión, aun sabiendo la limitación que hay con la velocidad del proceso computacional [19]. De igual manera, Keskin *et al* investigaron sobre las temperaturas de transición de fase dinámica y los diagramas de fase dinámicos de un sistema Ising mixto de espines 1 y 2 en presencia de un campo magnético oscilante, con un enfoque en la teoría de campo medio [20]. También, en presencia de diferentes anisotropías se describen las propiedades magnéticas del sistema ferromagnético con una configuración de espines como la anterior, encontrando fenómenos reentrantes validados por el método Monte Carlo tal como aparece en la investigación de Wei *et al* [21].

Teniendo en cuenta toda esta evidencia teórico-experimental se logró analizar el comportamiento de nuestro sistema en estudio el ferromagneto de espines  $S = 3$  y  $Q = 1$ , donde fue necesario caracterizar variables termomagnéticas asociadas a él por medio de simulaciones Monte Carlo, un algoritmo tipo baño térmico y condiciones de borde periódicas. Siendo más concretos, en esta investigación se analizó el efecto producido por los campos cristalinos de las subredes ( $D_S$ ,  $D_Q$ ) y un campo magnético externo ( $h$ ) sobre las propiedades del sistema mediante los diagramas de fase a temperatura finita de la energía, el calor específico, la magnetización, la susceptibilidad magnética y la temperatura crítica. Cabe destacar que hasta donde conocemos, de este modelo no existen más trabajos realizados, por lo cual se pretende dar un aporte nuevo a la sociedad científica. El resto del trabajo está diseñado de la siguiente forma: en el capítulo 2 se estudia el fenómeno del magnetismo y los diversos modelos magnéticos, en el capítulo 3 se investigan los diagramas de fase a

temperatura finita de las variables termomagnéticas del modelo y en el capítulo 4 se esbozan las conclusiones.

## Capítulo 2

### Magnetismo y Estructuras de Modelos Magnéticos

En este capítulo describimos brevemente los conceptos fundamentales del magnetismo y los tipos de estructuras y fenómenos que se pueden presentar en los modelos magnéticos. De igual manera resumimos la técnica computacional Monte Carlo que se usa para la obtención de los diagramas de fase a temperatura finita de las variables físicas del ferromagneto de espines  $S = 3$  y  $Q = 1$ .

#### 2.1 Origen del Magnetismo

El magnetismo es uno de los fenómenos naturales más sorprendentes y extraordinarios que existen. Este fenómeno tiene su origen en un ordenamiento a nivel atómico de los momentos magnéticos de forma espontánea. Gran parte de la teoría del magnetismo se encarga de estudiar el comportamiento de una cantidad fundamental como es el momento magnético. Basados en él se pueden explicar diversos fenómenos magnéticos a escala macroscópica y microscópica.

Clásicamente el momento magnético se define a partir de cargas moviéndose en trayectorias cerradas como se ve en la figura 2.1.

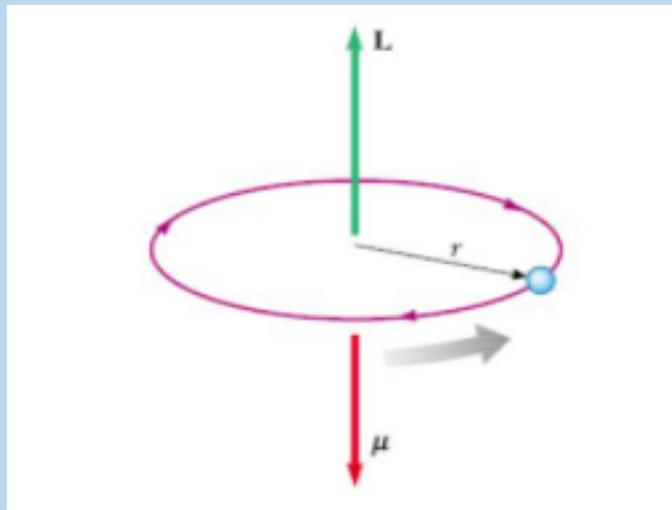


Figura 2.1: Representación clásica del momento magnético  $\mu$ .

Si se tiene una corriente  $I$  que encierra un área infinitesimal con magnitud  $|dS|$ , el momento magnético asociado se define como  $d\vec{\mu} = Id\vec{S}$  y se expresa en unidades de amperio por metro cuadrado ( $Am^2$ ). Sin embargo, una descripción más precisa muestra que el momento magnético se origina en el interior de los átomos debido a tres cantidades físicas fundamentalmente: la primera es el momento angular orbital de los electrones en torno al

núcleo del átomo; segundo a los momentos magnéticos asociados con los espines de los electrones y los núcleos; y tercero el cambio en el momento angular orbital que se puede presentar debido a la presencia de un campo magnético aplicado al material [22] [23].

Se puede demostrar una relación existente entre el momento magnético y el momento angular de un electrón en un átomo mediante la expresión:  $\vec{\mu} = \gamma \vec{L}$ , donde  $\gamma$  es el factor geomagnético que para el electrón toma el valor  $\gamma = -e/2m_e$  y  $m_e$  es la masa en reposo del electrón.

La cantidad apropiada para medir momentos magnéticos atómicos es el magnetón de Bohr que se define como:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274 \times 10^{-24} \text{ Am}^2 = 5,7884 \times 10^{-2}$$

Donde  $e$  es la carga del electrón y  $\hbar$  es la constante de Planck dividida por  $2\pi$ .

Cuando un momento magnético  $\vec{\mu}$  interactúa con un campo magnético externo  $\vec{B}$ , hay una energía potencial involucrada que se describe como [24]:

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (2.1)$$

Una vez descrito brevemente el origen del magnetismo junto con su cantidad fundamental (momento magnético), el siguiente paso es enunciar los tipos de magnetismo que se presentan en la materia debido a la forma en que los momentos magnéticos se organizan. Los tipos básicos de magnetismo incluyen diamagnetismo, paramagnetismo y ferromagnetismo (el antiferromagnetismo y el ferrimagnetismo se consideran subclases de ferromagnetismo). Todos los materiales exhiben al menos uno de estos tipos y la clasificación depende de la respuesta del electrón y los dipolos magnéticos atómicos a la aplicación de un campo magnético.

## 2.2 Estructuras Magnéticas

Los materiales magnéticos han sido divididos de acuerdo a sus propiedades magnéticas y a los momentos dipolares magnéticos de los átomos e interacciones entre átomos, de la siguiente manera: diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos, antiferromagnéticos y ferrimagnéticos. A continuación, describiremos las definiciones de los diferentes tipos de materiales, en especial al que se someterá a estudio en este trabajo.

### 2.2.1 Ferromagnetismo

En los materiales ferromagnéticos cada campo magnético de origen atómico es producido por un dipolo o un momento magnético y cada uno está ordenado con los otros, es decir, todos permanecen perfectamente orientados y unidos por una fuerza cohesiva. La energía involucrada en este proceso se le llama “energía de intercambio o canje magnético”. Si se quiere cambiar la dirección de uno de los dipolos, los restantes tratarán de mantenerlo en su posición. Una imagen análoga es la de una convencional cerca de madera con muchas tablas

verticales unidas por dos travesaños (estado ordenado). Si alguien se apoya sobre una de las tablas verticales, la unión entre ellas ejerce una fuerza que se opone a la acción de apoyarse e impide que la tabla se incline lo suficiente como para tocar el suelo. Esta fuerza o unión juega un papel importante entre los dipolos obligándolos a que actúen en forma cooperativa. Para vencer esta energía de cohesión se necesita otro tipo de energía como la energía térmica, por ejemplo. A la temperatura por encima de la cual los dipolos se desordenan completamente se le denomina *temperatura de orden, crítica o de Curie* ( $T_C$ ), algo así como si alcanzada esta temperatura los travesaños de la cerca desaparecen repentinamente y las tablas caen para un lado y otro, pero algunas quedan paradas (estado desordenado). Ahora, si se baja la temperatura por debajo de  $T_C$ , espontáneamente aparecen nuevamente los travesaños y se forma una cerca perfectamente ordenada. Los sistemas reales, como hierro, cobalto y níquel, por ejemplo, tienen una temperatura  $T_C$  de 1043 °C, 1380 °C y 630 °C respectivamente. A mayor temperatura de orden, mayor es la energía de intercambio involucrada [25].

### ***2.2.1.1 Fundamentos Físicos del Ferromagnetismo***

Los materiales ferromagnéticos y ferrimagnéticos presentan un momento dipolar magnético espontáneo en ausencia de campo magnético aplicado, observándose este fenómeno solo por debajo de  $T_C$ . Su comportamiento es, por ello, distinto al de los materiales paramagnéticos, cuyos dipolos elementales han de ser orientados por un campo magnético para exhibir momento magnético.

Los fenómenos que se tratarán en esta sección se deben a interacciones de naturaleza cuántica entre momentos magnéticos. Estas interacciones son lo suficientemente fuertes como para producir el alineamiento mutuo de los momentos magnéticos. La interacción alineadora entre momentos magnéticos sólo será importante si es grande comparada con los mecanismos que pueden alterar la ordenación, especialmente la energía térmica vibracional que naturalmente tenderá a desordenar los momentos magnéticos del material. Los tipos de ordenaciones de dipolos o momentos magnéticos que dan lugar a un momento magnético espontáneo (excepto en el caso del antiferromagnético sencillo) son los siguientes [26]:

#### ***Observaciones Experimentales:***

Las principales observaciones experimentales asociadas a los materiales ferromagnéticos son las siguientes:

1. Imantación espontánea en ausencia de campo magnético externo.
2. La imantación espontánea varía con la temperatura alcanzando un máximo para  $T=0K$  y presentando una disminución continua al aumentar la temperatura hasta caer fuertemente para la temperatura de Curie ferromagnética ( $T_C$ ).
3. Para  $T > T_C$  el material experimenta una transición de fase magnética de un estado ferromagnético a uno paramagnético con una susceptibilidad en la fase paramagnética dada por la ecuación:

$$\chi = \frac{C}{(T-T_c)} \quad (2.2)$$

Esta relación es una modificación de la ley de Curie para materiales paramagnéticos en la cual C no está definida para  $T < T_c$  donde el material presenta imantación espontánea.

4. Un material ferromagnético no tiene una imantación espontánea en la misma dirección a lo largo de todo su volumen, sino que presenta regiones más pequeñas de imantación de dirección uniforme llamadas *dominios magnéticos* con orientación al azar unas respecto a otras.
5. Los únicos elementos ferromagnéticos son: hierro (Fe), cobalto (Co), Níquel (Ni), gadolinio (Gd) y disprosio (Dy) [27].

La figura 2.2 muestra un arreglo esquemático de los momentos magnéticos o espines en una estructura ferromagnética.

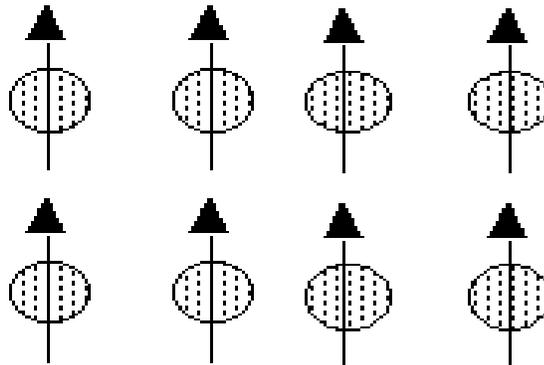
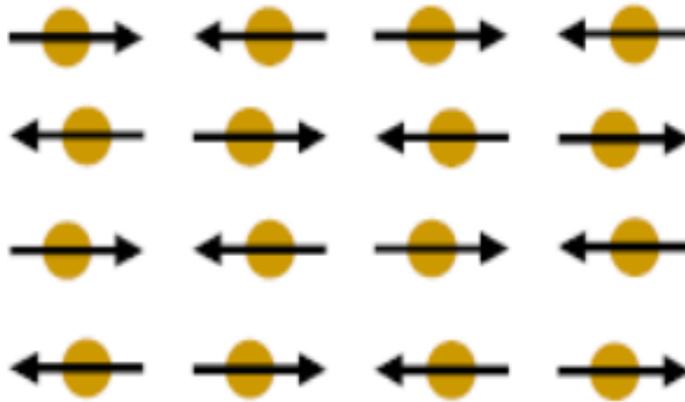


Figura 2.2: Representación esquemática del ordenamiento de los momentos magnéticos en una estructura ferromagnética.

### 2.2.2 Antiferromagnetismo

En los materiales antiferromagnéticos los momentos magnéticos producidos en los dipolos circundantes se alinean oponiéndose unos a otros en el campo magnético, teniendo una magnetización nula. La diferencia entre el antiferromagnetismo y el ferromagnetismo es la interacción entre los dipolos circundantes, ya sea que se refuercen o se opongan entre sí, ver figura 2.3 [30].



*Figura 2.3: Representación esquemática del ordenamiento de los momentos magnéticos en una estructura antiferromagnética.*

En las sustancias antiferromagnéticas los momentos magnéticos pueden dividirse en dos subredes, que se interpenetran mutuamente, en la que todos los dipolos asociados a una de las subredes son paralelos entre sí mientras que son antiparalelos con respecto a los dipolos de otra subred. Como los efectos de las dos subredes se compensan no dan lugar a campos magnéticos exteriores y el campo magnético es cero [30]. La susceptibilidad magnética es pequeña (casi cero) y positiva. Algunos ejemplos de antiferromagnéticos son compuestos como la hematita ( $Fe_2O_3$ ), el fluoruro de níquel ( $NiF_2$ ) o el óxido de hierro ( $FeO$ ) [31].

### **2.2.3 Ferrimagnetismo**

En un campo magnético los dipolos de un ión  $A$  pueden alinearse con el campo mientras que los dipolos de un ión  $B$  se oponen al campo. Debido a que la resistencia de los dipolos no es igual resulta una magnetización neta. Los materiales ferrimagnéticos pueden proporcionar una buena intensificación del campo aplicado. Los momentos magnéticos están en posiciones anti-paralelas y tienen distintas magnitudes, ver figura 2.4 [30].

La susceptibilidad magnética en estos materiales es grande y positiva, son de valor comercial considerable debido a su gran resistencia eléctrica y pueden emplearse para altas frecuencias sin pérdidas provocadas por las llamadas *corrientes parásitas* [31].

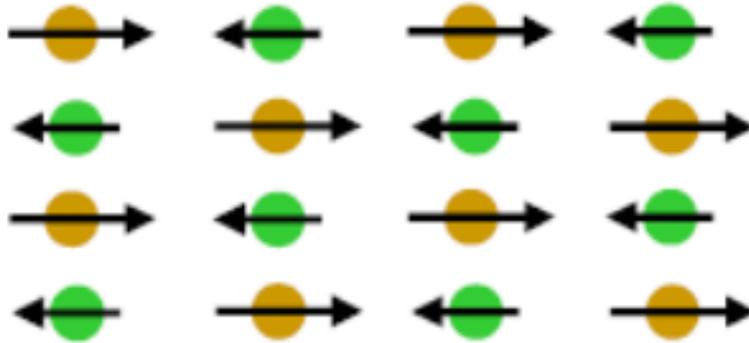


Figura 2.4: Representación esquemática del ordenamiento de los momentos magnéticos en una estructura ferrimagnética.

### 2.3 Mecánica Estadística en el Estudio de los Materiales Magnéticos

El mundo que uno percibe a través de los sentidos se compone de objetos macroscópicos, es decir, grandes comparados con la escala atómica, y por lo tanto compuesto de muchos átomos o moléculas. En este sentido se incluyen, por ejemplo: líquidos, sólidos, gases y organismos biológicos en general. El objetivo de la mecánica estadística es comprender el comportamiento de estos sistemas deduciendo sus características a partir del conocimiento de las propiedades microscópicas [32].

Los sistemas macroscópicos están compuestos por un número pequeño de constituyentes distintos, haciendo que estos sean descritos matemáticamente de una manera simple. Pero el número de ecuaciones hace que sea prácticamente imposible resolverlas [33].

No será muy sabio resolver las ecuaciones de movimiento de estos sistemas por el número grande de las mismas, pero las propiedades macroscópicas del sistema parecen comportarse de manera predecible y no brusca. De esta manera, la mecánica estadística pretende calcular estas propiedades de sistemas grandes tratándolos de una manera probabilística de que un sistema se encuentre en un cierto estado.

### 2.4 El Modelo de Ising

En ciertos metales como hierro (Fe) o níquel (Ni), una fracción de espines de átomos se polarizan espontáneamente en la misma dirección, inclusive sin campo magnético externo aplicado, provocando la aparición de un campo magnético microscópico. Esto sugiere que el arreglo de espines electrónicos y momentos magnéticos es regular, siendo no necesariamente de manera simple. Los arreglos indicados presentan un momento magnético espontáneo llamado *momento de saturación* únicamente cuando la temperatura es menor a la temperatura característica conocida como la temperatura de Curie ( $T_C$ ). Cuando  $T = T_C$  se dice que el sistema pasa por

una transición de fase de segundo orden o continua. Por encima de la temperatura de Curie los espines se encuentran orientados aleatoriamente produciendo en consecuencia un campo magnético nulo debido al movimiento térmico de los espines [34][35].

El modelo de Ising [36], nombrado gracias al físico Ernest Ising, es un modelo matemático que describe materiales magnéticos, como es el caso de los ferromagnetos y antiferromagnetos simples. El modelo parte de la base de que el magnetismo presente en el material es una combinación de momentos de dipolos magnéticos de muchos espines atómicos en el material. El modelo postula una red de geometría arbitraria, donde un espín se encuentra ubicado en cada lugar del mismo. El valor de los espines puede ser únicamente  $\pm 1$ , y las interacciones se replican mediante un término  $S_i S_j$ . En el caso más simple estas interacciones son de la misma magnitud, denotada por  $J$  y entre los espines más cercanos. A su vez, se puede introducir un campo magnético externo  $h$  que se acople con los espines. De esta manera el Hamiltoniano toma la forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (2.3)$$

Donde  $\langle ij \rangle$  denota suma a primeros vecinos. Para valores de  $J$  positivos el modelo describe materiales ferromagnéticos donde los espines tienden a alinearse entre ellos, mientras para  $J$  negativos el modelo describe materiales antiferromagnéticos [34].

Los estados del sistema son todos aquellos correspondientes a los distintos valores que pueden tomar los espines. Dado que cada uno puede tomar dos valores, si la red posee  $N$  lugares, entonces el sistema tendrá  $2^N$  valores posibles.

De lo expuesto en el párrafo anterior surge el siguiente interrogante *¿cuáles son las principales cantidades termodinámicas de interés para el modelo de Ising y para el trabajo en general?*

Se puede calcular la magnetización haciendo un promedio sobre los estados

$$\langle M \rangle = \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \quad (2.4)$$

Aunque uno está más interesado en la magnetización media por espín, ya que no depende del tamaño de la red.

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \quad (2.5)$$

Podemos usar las fluctuaciones para calcular la susceptibilidad magnética por espín.

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (2.6)$$

Similarmente con el calor específico por espín a partir de las fluctuaciones en la energía:

$$C_v = \frac{k\beta^2}{N} = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (2.7)$$

### 2.4.1 Modelo de Ising en dos Dimensiones

Este modelo fue resuelto por primera vez por L. Onsager. Utilizando la técnica de matriz de transferencia con campo magnético nulo mostró que los exponentes críticos del modelo eran muy diferentes de aquellos que da la teoría de Landau, que hasta aquel momento estaba considerada como correcta [37]. Por largo tiempo esta solución fue la única que planteaba un tratamiento matemático riguroso y cuyo resultado exhibe una transición de fase. Antes de esa solución se pensó que la formulación de la mecánica estadística no explicaría las transiciones de fase [38] y posteriormente C. Yang lo realiza en presencia de un campo magnético externo [39]. Más tarde la realización de este modelo se dio aplicando diferentes técnicas de cálculo.

Cuando se trabaja con el modelo bidimensional, es conveniente identificar a los espines  $S_i$  a través de dos índices que indiquen su localización en la red. Si en esta hay un total de  $N = N_x N_y$  sitios, es decir,  $N_x$  en la dirección horizontal y  $N_y$  en la dirección vertical, entonces el modelo tiene  $2^N$  posibles configuraciones, cada una de las cuales está determinada por el conjunto:

$$\{S_i\} = \{S_{1,1}, S_{1,2}, \dots, S_{1,N_x}, \dots, S_{N_y,1}, S_{N_y,2}, \dots, S_{N_y,N_x}\}$$

Donde  $S_{i,j} = \pm 1$

El Hamiltoniano del modelo en red cuadrada, en presencia de un campo magnético externo, está dado entonces por:

$$H = -J \left( \sum_i \sum_j S_{i,j} S_{i+1,j} + \sum_i \sum_j S_{i,j} S_{i,j+1} \right) - h \sum_i \sum_j S_{i,j} \quad (2.8)$$

Donde  $J$  es la constante de interacción de intercambio entre dos espines,  $h$  el campo magnético externo que se supone en la misma dirección de los espines, y el término  $-h \sum_i \sum_j S_{i,j}$  denota lo que se conoce como energía de Zeeman del sistema [40]. A continuación, se mostrará un esquema de dicho modelo:

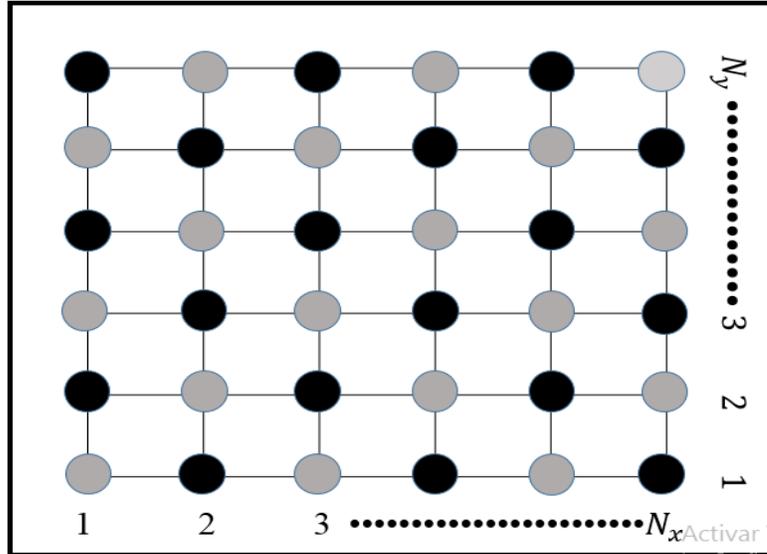


Figura 2.5: Representación esquemática de un Modelo de Ising bidimensional.

## 2.5 Transiciones de fase

Las leyes fundamentales de la naturaleza que gobiernan las propiedades de la materia exhiben una serie de distintas propiedades de simetría. Estas leyes son invariantes con respecto a las traslaciones espaciales y temporales, y también con respecto a las rotaciones y las inversiones. Los estados que existen en la naturaleza no muestran, en general, la simetría completa de sus principios naturales subyacentes [41]. Una transición de fase ocurre cuando hay una singularidad en la energía libre o en una de sus derivadas. Siendo visible un cambio abrupto en algunas de las propiedades de la sustancia. Las transiciones de líquido a gas, de un conductor normal a un superconductor, de un paramagneto a un ferromagneto son ejemplos comunes de ello [42].

### 2.5.1. Ejemplos de Transiciones de Fase

Queremos enumerar sólo algunos ejemplos entre la multitud de transiciones de fase que se conocen. En el área de sustancias magnéticas se encuentran antiferromagnetos, por ejemplo con dos subredes que tienen direcciones opuestas de magnetización  $M_1$  y  $M_2$ , ferromagnetos y fases helicoidales. En un antiferromagneto con dos subredes, el parámetro de orden es  $N = M_1 - M_2$ , la llamada *magnetización escalonada*. En mezclas líquidas binarias, existen transiciones de separación donde el parámetro de orden caracteriza la *concentración*. En el caso de transiciones de fase estructurales, la estructura reticular cambia en la transición y el parámetro de orden es dado por el campo de *desplazamiento* o *el tensor de deformación*. Ejemplos de ellos son los ferroeléctricos y transiciones distorsionantes, donde el parámetro de orden está dado por la *polarización eléctrica*  $P$  o el ángulo de rotación de un grupo molecular [41].

### ***2.5.2 Transiciones de Fase en el Modelo Ising Ferromagnético***

A continuación, se describirá con mayor detalle el comportamiento de algunas variables termodinámicas cerca de una transición de fase en el caso de un modelo ferromagnético con el objetivo de brindar una mayor claridad del asunto.

Los diagramas de fases se muestran en la figura 6(a). Hay una línea de transición de primer orden a campo cero ( $H = 0$ ) que va desde temperatura cero hasta una temperatura crítica  $T = T_C$ . Primero se describirá la dependencia con el campo externo de la energía libre y sus derivadas: La magnetización y la susceptibilidad, para los caminos señalados como 1, 2 y 3 en la figura 6(a). El objetivo será comparar estas funciones en las tres regiones: debajo, por encima y en  $T = T_C$ .

La energía libre se muestra en la figura 6(b). La función es convexa y hay simetría alrededor del punto  $H = 0$ . Se desarrolla un pico en  $H = 0$  para  $T < T_C$ , lo que marcaría una transición de primer orden, lo cual se verá más claramente para la magnetización. La variación de la magnetización con el campo externo se muestra en la figura 6(c). Para  $T > T_C$  varía continuamente. Sin embargo, para  $T < T_C$  hay un salto en  $H = 0$  lo que indica una transición de primer orden. A  $T = T_C$  la función es continua, pero presenta una pendiente infinita en  $H = 0$ .

Derivando nuevamente se obtiene la susceptibilidad  $\chi$  mostrada en la figura 6(d). Para  $T > T_C$  es una función suave en función del campo como es de esperarse. Cuando  $T < T_C$  presenta un pico en la transición de primer orden para  $H = 0$ . Mientras que en el punto crítico la susceptibilidad diverge, lo cual es un comportamiento característico de una transición de fase continua.

También uno podría estar interesado en cómo varían tanto la magnetización como la susceptibilidad a campos fijos; camino 4, 5 y 6 de la figura 6(a). Estas figuras se muestran en 6(e) y (f). Nótese que no se puede cruzar una línea de transición de primer orden mediante la variación de la temperatura. Siguiendo el camino 5 para  $H = 0$  se pasa por  $T = T_C$  para luego pasar por una línea de coexistencia de dos fases hasta  $T = 0$ . A lo largo de los caminos 4 y 6, equidistantes de  $H = 0$ , no hay una transición de fase. La dependencia de la magnetización con la temperatura se muestra en la figura 6(e). Para campos no nulos, la magnetización es una función suave incrementándose para temperaturas decrecientes, apuntando todos los espines en la misma dirección que el campo en el límite de temperatura cero.

Para  $H = 0$  no hay una dirección preferencial marcada por el campo. En el caso de  $T > T_C$  es igualmente probable que los espines apunten tanto para arriba como para abajo. De esta manera, la magnetización neta es cero. La magnetización aumenta desde cero en  $T = T_C$  hasta un valor de saturación a temperatura cero. Finalmente, en la figura 6(f) se muestra la susceptibilidad en función de la temperatura. Para campos finitos existe un pico de susceptibilidad en el punto crítico. Mientras que para  $H = 0$  hay una divergencia marcando el punto crítico.

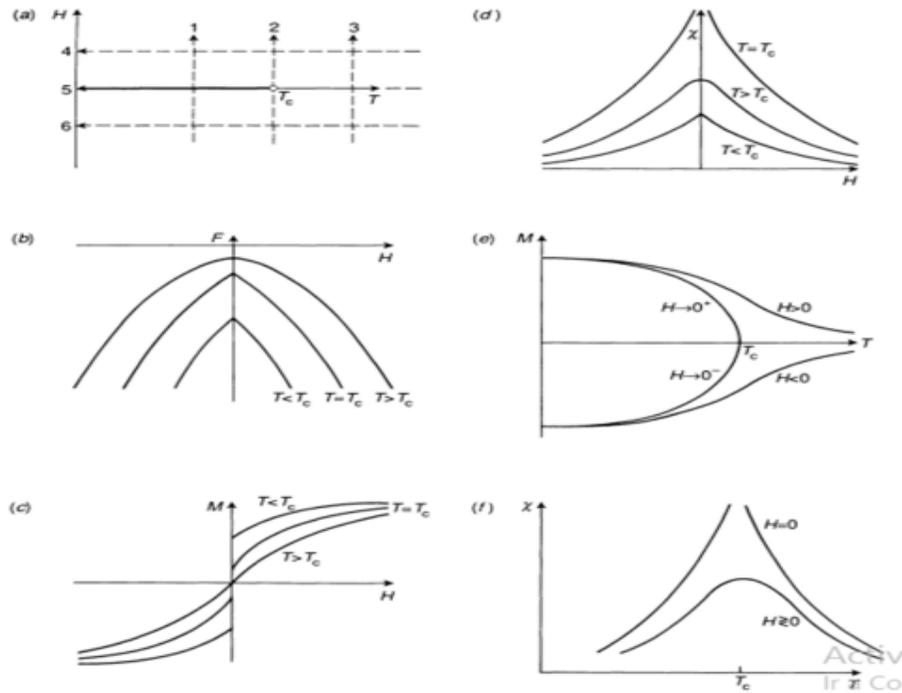


Figura 2.6: (a) Diagramas de fase de un ferromagneto. (b) Dependencia con el campo de la energía libre. (c) Dependencia con el campo de la magnetización. (d) Dependencia con el campo de la susceptibilidad. (e) Dependencia de la magnetización con la temperatura. (f) Dependencia de la susceptibilidad con la temperatura. Figura obtenida de [42].

## 2.6 Simulaciones Computacionales en Equilibrio Térmico

Las simulaciones son utilizadas cuando al realizar experimentos en sistemas reales es imposible o impracticable. Esto puede ser debido al alto costo de realización o prueba, o debido a que la fragilidad del sistema no soportará pruebas exhaustivas, o porque la duración en tiempo real del sistema lo hace irrealizable [43].

Con relación al presente trabajo existen sistemas físicos reales que poseen problemas para entender su comportamiento cuando poseen muchas partículas interactuantes en proceso de una transición de fase. Para ello se propone un Hamiltoniano que pueda tener las características esenciales de algún sistema las cuales se puedan determinar mediante la simulación.

Otra ventaja de realizar simulaciones está relacionada con que diferentes efectos físicos que están simultáneamente presentes en sistemas reales, pueden ser aislados mediante distintas consideraciones en la simulación, proveyendo un mejor entendimiento del sistema.

El objetivo de una simulación no es proveer un mejor ajuste a los resultados experimentales como lo hace la teoría analítica. El objetivo es crear un entendimiento de las propiedades físicas y procesos tan completos como sea posible, haciendo uso del control de las “condiciones experimentales de la computadora” y la posibilidad de examinar cada aspecto

de las configuraciones del sistema en detalle. Resultando en la dilucidación del mecanismo responsable de un determinado fenómeno observado.

### **2.6.1 Simulación Monte Carlo**

El método de Monte Carlo es un método numérico que permite resolver problemas físicos y matemáticos mediante la simulación de variables aleatorias. En particular este es uno de los métodos numéricos más importante para solucionar problemas físico-estadísticos. En el método Monte Carlo se simula directamente el proceso en estudio, creando un modelo del sistema y haciendo que este pase sobre una gran cantidad de estados posibles que se calculan probabilísticamente. Esto se hace de acuerdo a una cierta distribución estocástica que calcula los valores esperados de los observables físicos deseados. Para determinar la distribución probabilística es necesario que ésta modele al sistema en el caso real, es decir, cuando el sistema se encuentre en equilibrio termodinámico.

Una gran ventaja de esta técnica es que no se necesitan todos los estados de un sistema para encontrar estimativos de los observables físicos, sin embargo, este método conlleva a errores estadísticos y otros generados por la correlación entre los datos consecutivos cuando se genera una *cadena de Markov* [44].

### **2.6.2 Aspectos Importantes de la Simulación Monte Carlo**

A continuación, se definirán unos aspectos de gran importancia para la ejecución de la simulación Monte Carlo usada en este trabajo.

#### **2.6.2.1 Muestreo de Importancia**

Un concepto de gran trascendencia en la simulación Monte Carlo es el “*muestreo de importancia*”, este básicamente da cuenta de la forma como se escogen los estados que van a representar el sistema. La forma como se escogen los estados influye tanto en los errores estadísticos y correlativos como en el tiempo computacional de los programas. En una simulación Monte Carlo la generación de estados al azar no tiene sentido, porque existe la posibilidad de generar estados poco probables en condiciones físicas reales. Por tal motivo se escoge la probabilidad de ocurrencia de un estado conforme al formalismo propio de una colectividad canónica como se muestra en la siguiente ecuación [44].

$$p_{\mu} = \frac{e^{-\beta E_{\mu}}}{Z} \quad (2.9)$$

donde  $Z$  es la función de partición del sistema,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $T$  la temperatura y  $E_{\mu}$  la energía del estado  $\mu$ .

### 2.6.2.2 Procesos de Markov

Otro aspecto importante en las simulaciones Monte Carlo es el mecanismo de tránsito de un estado a otro; en este método el proceso de Markov es el que se usa para generar la sucesión de los estados a estudiar.

Un *proceso de Markov* es un mecanismo que, dado un sistema en un estado  $\mu$ , genera un nuevo estado de ese sistema  $\nu$ . No generará el mismo estado cada vez que le es dado el estado inicial  $\mu$ . La probabilidad de generar un estado  $\nu$  dado  $\mu$  es llamada la *probabilidad de transición*  $p(\mu \rightarrow \nu)$  para la transición de  $\mu$  a  $\nu$ . En un verdadero proceso de Markov estas transiciones de probabilidad deberán satisfacer dos condiciones: a) Las probabilidades de transición deben ser estacionarias; lo que implica que no cambian con el tiempo y b) depender únicamente de las propiedades de los estados en consideración  $\mu$  y  $\nu$  y no de algún otro estado. Así mismo deberá cumplir la condición de normalización:

$$\sum_{\nu} p(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (2.10)$$

En las simulaciones Monte Carlo se utilizan procesos de Markov repetidamente para generar una *cadena de Markov* de estados, es decir, dado un estado  $\mu$ , este proceso genera un estado nuevo  $\nu$ , luego este otro  $\eta$  y así sucesivamente.

Por otro lado, para que el proceso de Markov simule adecuadamente la trayectoria del sistema en el espacio de fases, este debe converger hacia una sucesión de estados dados por una probabilidad de *distribución de Boltzmann* o, lo que es lo mismo, el sistema debe aproximarse a una distribución de estados en equilibrio. Para esto último se imponen dos condiciones: La *ergodicidad* del sistema y el *balance detallado* [45] [46].

#### 2.6.2.2.1 Ergodicidad

La condición de ergodicidad significa que en el proceso de Markov si se parte de cualquier estado del sistema es posible llegar a cualquier otro estado del sistema, siempre y cuando exista una cadena lo suficientemente larga. Esta condición permite hacer cero algunas de las probabilidades de transición, pero establece que al menos debe haber un camino de probabilidades no nulas entre las cuales dos estados se puedan unir [44]. En la práctica, los algoritmos Monte Carlo eligen casi todas las probabilidades de transición igual a cero, pero teniendo en cuenta que esta condición no sea violada.

#### 2.6.2.2.2 Balance Detallado

El balance detallado quiere decir que cuando el sistema llega al equilibrio es la distribución de Boltzmann la que se alcanza; entendiendo el estado de equilibrio como aquel en que la tasa a la que el sistema transita del estado  $\mu$  hacia otros estados es igual a la tasa a la que el sistema transita desde otros estados al estado  $\mu$ . Matemáticamente esto se puede expresar de la siguiente manera:

$$\sum_{\nu} p_{\mu} p(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} p(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.11)$$

Usando la condición de normalización, ecuación (2.10), la ecuación (2.11) quedara:

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} p(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.12)$$

Esta ecuación no garantiza que se alcance la distribución de probabilidad esperada. Para esto proponemos la condición adicional:

$$p_{\mu} p(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} p(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.13)$$

Esta ecuación es llamada *balance detallado*. Como podemos ver, la parte izquierda de la ecuación indica el ritmo total en que ocurren las transiciones de  $\mu$  a  $\nu$  en el sistema, pero la parte derecha indica el ritmo de la transición inversa. Dicho esto, se puede elegir una distribución de probabilidad de estados generada por la cadena de Markov que tiende a cualquier distribución  $p_{\mu}$  deseada y la escribimos de la siguiente manera:

$$\frac{p(\mu \rightarrow \nu)}{p(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\mu} - E_{\nu})} \quad (2.14)$$

## 2.7 Algoritmo Metropolis

La descripción del algoritmo Metrópolis se muestra de la siguiente manera:

1. Se establece una configuración inicial  $\mu_i$  del sistema.
2. Se intenta un cambio aleatorio  $\nu_j$  de dicha configuración inicial.
3. Se calcula el cambio en la energía ( $\Delta E$ ) que se dio en el sistema debido al paso número 2.
4. Si el valor de  $\Delta E$  es menor o igual a cero se acepta dicha inversión y se va al paso número 8.
5. Si por el contrario  $\Delta E$  es positivo se calcula  $p(\mu_i \rightarrow \mu_j) = e^{-\beta(E_i - E_j)}$ .
6. Se genera un número aleatorio  $r$  en el intervalo  $0 \leq r \leq 1$ .
7. Si  $r \leq p(\mu_i \rightarrow \mu_j)$  se acepta la nueva configuración, de lo contrario se mantiene la configuración inicial. Nótese que las configuraciones que disminuyen la energía son siempre aceptadas.
8. Se calcula el valor de las cantidades físicas deseadas.
9. Se repiten los pasos 2 y 8 para disponer de un número suficiente de configuraciones.
10. Finalmente, se realizan los promedios de las cantidades calculadas [46].

## 2.8 Cálculo de errores

Cuando tenemos las variables físicas que deseamos medir, nos disponemos a calcular los promedios, para corroborar que tan buenos son los resultados. En el caso de la simulación Monte Carlo utilizada en este trabajo de grado, se tienen dos tipos de errores:

### *Estimación de los errores estadísticos:*

Una manera de determinar los errores sería considerar una simulación con  $n$  medidas, por ejemplo, para el calor específico por espín  $C_i$ , el mejor estimador será el valor medio de  $\bar{C}$  y el mejor estimador de la desviación estándar es:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n (C_i - \bar{C})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{1}{n-1} (\overline{C^2} - \bar{C}^2)} \quad (2.15)$$

Este método asume que las  $n$  muestras de  $C_i$  son independientes entre sí, aunque en general no lo sea.

### *Estimación de los errores sistemáticos:*

La principal fuente de errores sistemáticos es debida a esperar un tiempo finito entre medidas del sistema hasta que se equilibre. A diferencia de los errores estadísticos, no existe un método para estimar estos errores.

## 2.9 Algoritmo para Sistemas Mixtos de Ising: Algoritmo Tipo Baño Térmico

El ferromagneto en estudio presenta  $3^2 \cdot 7^2 = 441$  posibles configuraciones, debido a que los espines  $Q$  tienen tres posibles estados  $(\pm 1, 0)$  y los  $S$  tienen siete posibles estados  $(\pm 3, \pm 2, \pm 1, 0)$ ; de este modo no podemos utilizar el algoritmo de Metrópolis descrito anteriormente, donde escogemos un espín y se calcula la probabilidad que se invierta. En el caso que estamos tratando, dependiendo del estado de cada espín y sus vecinos, el cambio de energía asociado a la transición puede tener varios valores posibles, por este motivo usaremos el algoritmo tipo baño térmico para la simulación [45].

Básicamente en un algoritmo tipo baño térmico se escoge un espín, este podrá tomar un valor o quedar igual, pero debe seleccionarse en función del resto de espines que componen el sistema que se está estudiando. Entonces en este algoritmo escogemos la variable la cual se le dará la oportunidad de cambiar, quedando el resto del sistema constante como si fuera un baño térmico.

A continuación, mostraremos un ejemplo de cómo funciona el algoritmo tipo baño térmico, para el cual escogeremos un espín tipo  $S$ :

1. Escogemos un espín  $S$  de la red, que podrá tomar uno de los siete valores:  $(S = \pm 3, \pm 2, \pm 1, 0)$ .

2. Se calcula el cambio de energía  $\Delta E$ , sabiendo que la probabilidad de transición  $p_{ij} = p(\mu_i \rightarrow \mu_j) = e^{-\beta(E_i - E_f)}$ , asociado a cada uno de los siete posibles cambios  $[p_1, p_2, p_3, p_4, p_5, p_6, p_7]$ .
3. Se considera si se cambia a  $S_1 = 0, S_2 = 1, S_3 = 2, S_4 = 3, S_5 = -1, S_6 = -2$  y  $S_7 = -3$ .
4. Generando un número al azar  $r$ , tal que  $0 < r < (p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5 + p_6 + p_7)$ .
5. Si  $r < p_1$ , el espín queda como  $S$ , si no, se avanza.
6. Si  $r < p_1 + p_2$ , se cambia al espín  $S_2$ , si no, se avanza.
7. Si  $r < p_1 + p_2 + p_3$ , se cambia al espín  $S_3$ , si no, se avanza.
8. Si  $r < p_1 + p_2 + p_3 + p_4$ , se cambia al espín  $S_4$ , si no, se avanza.
9. Si  $r < p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5$ , se cambia al espín  $S_5$ , si no, se avanza.
10. Si  $r < p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5 + p_6$ , se cambia al espín  $S_6$ , si no se cambia al espín  $S_7$ .

Este algoritmo muestra que si el cambio es favorable  $p_{ij} = p(\mu_i \rightarrow \mu_j)$  aumenta exponencialmente con la diferencia de energía  $\Delta E$ . Si por el contrario la probabilidad de transición  $p_{ij} = p(\mu_i \rightarrow \mu_j)$  disminuye exponencialmente con el cambio de energía, ( $\Delta E > 0$ ) este será desfavorable. Existirá una probabilidad constante cuando la diferencia de energía sea constante, esto es,  $\Delta E = 0$ , es decir, el espín no cambiará.

## Capítulo 3

### Resultados y Análisis

En este capítulo presentamos un detallado análisis del comportamiento termomagnético del modelo ferromagnético de espines  $S = 3$  y  $Q = 1$ , considerando interacciones a primeros vecinos y campos anisotrópicos ( $D_S$ ,  $D_Q$ ) y magnético longitudinal externo ( $h$ ). Iniciamos con el estudio de los diagramas de fase a temperatura finita de la energía ( $E$ ), del calor específico ( $C$ ), las magnetizaciones totales y de las subredes, la susceptibilidad magnética total ( $\chi_T$ ) y la temperatura crítica ( $T_C$ ) en función del campo  $h$ .

#### 3.1. Hamiltoniano de Interacción

Consideramos el sistema ferromagnético tipo Ising mixto de espín-3 y espín-1 en un campo magnético longitudinal, para el caso con interacciones a primeros vecinos. Los espines se encuentran en sitios alternados de una red cuadrada de tamaño  $L \times L$  con  $L = 80$ . El sistema se define a través del Hamiltoniano

$$H = -J_1 \sum_{\langle nn \rangle} S_i Q_j - D_S \sum_{i \in A} (S_i)^2 - D_Q \sum_{i \in B} (Q_i)^2 - h \left( \sum_{i \in A} S_i + \sum_{i \in B} Q_i \right) \quad (3-1)$$

Donde  $S = 3$  y  $Q = 1$  son los espines en los sitios de las subredes interpenetradas  $A$  y  $B$ , respectivamente.  $J_1$  es el parámetro de intercambio a primeros vecinos en la red,  $D_S$  y  $D_Q$  son campos cristalinos de las subredes que forman el sistema y  $h$  es un campo magnético longitudinal externo. La primera suma se realiza sobre todos los pares de espines de vecinos más cercanos, es decir, entre los espines  $S$  y  $Q$ . Las sumas sobre  $i$  y  $j$  se llevan a cabo en todos los sitios de las subredes  $A$  y  $B$ , respectivamente. Consideramos un acoplamiento ferromagnético entre primeros vecinos ( $J_1 > 0$ ) y tomamos condiciones de borde periódicas. Cabe mencionar que todos los parámetros del Hamiltoniano están en unidades de energía.

La simulación del modelo se realiza mediante un método Monte Carlo a través de un algoritmo tipo baño térmico. Los datos se obtienen con  $M = 5 \times 10^4$  pasos Monte Carlo por sitio de red, después de descartar los primeros  $10^4$  pasos por sitio para alcanzar el equilibrio. Los errores se estiman utilizando el método de bloques, donde la muestra se divide en  $b$  bloques, de manera que cada bloque tiene  $M_b = \frac{M}{b}$  medidas. Por tanto, los errores pueden calcularse como la desviación estándar de las medidas de los bloques, para este trabajo utilizamos  $b = 10$ .

#### 3.2. Variables Termomagnéticas del Modelo

Para el análisis de las propiedades termomagnéticas del sistema en estudio calculamos numéricamente en función de la temperatura los efectos de un campo magnético externo en la energía, el calor específico, la magnetización total y de las subredes; así como también en la susceptibilidad magnética y la temperatura crítica. Dichas cantidades describen

termodinámicamente el sistema. Estas variables físicas están definidas por las siguientes expresiones:

$$E = \frac{1}{L^2} \langle H \rangle \quad (3-2)$$

$$C = \frac{\beta^2}{L^2} \{ \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 \} \quad (3-3)$$

$$M_S = \frac{2}{L^2} \langle \sum_i S_i \rangle \quad (3-4)$$

$$M_Q = \frac{2}{L^2} \langle \sum_j Q_j \rangle \quad (3-5)$$

$$M_T = \frac{1}{2} (M_S + M_Q) \quad (3-6)$$

$$\chi_T = \frac{\beta}{L^2} \{ \langle M_T^2 \rangle - \langle M_T \rangle^2 \} \quad (3-7)$$

### 3.3. Efectos del Campo Magnético Externo $h$ Sobre las Variables Termomagnéticas.

En las siguientes subsecciones se describe la influencia del campo magnético externo  $h$  sobre los diagramas de fase a temperatura finita de las variables definidas en las ecuaciones (3-2), (3-3), (3-4), (3-5), (3-6) y (3-7).

#### 3.3.1 Efecto de $h$ sobre la energía $E$

El comportamiento de la energía en función de la temperatura se presenta en las figuras 3.1, 3.2 y 3.3 para diversos valores del parámetro  $h$ . En todos los casos podemos notar el crecimiento de la energía a medida que se incrementa la temperatura, así como también el cambio de concavidad experimentado por las curvas en las proximidades de la temperatura crítica, señaladas en las gráficas como  $T_C$ .

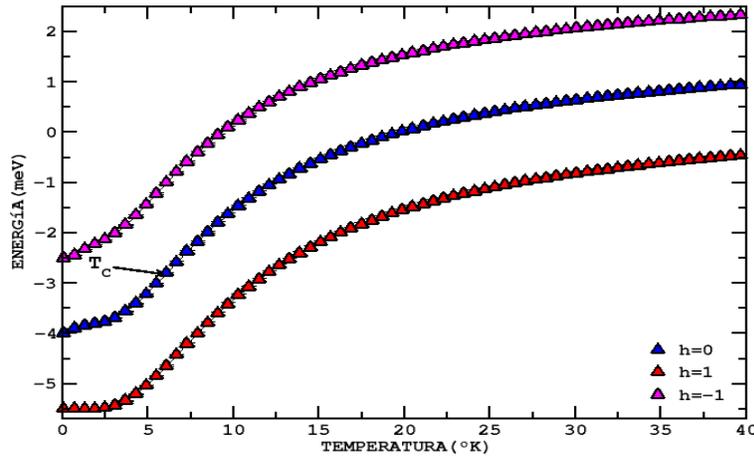


Figura 3.1: Energía por espín en función de la temperatura para diversos valores de  $h$ , con  $J_1 = 1$ ,  $D_s = -0.5$  y  $D_Q = 4$ .

Para temperaturas muy grandes las curvas de energía tienden a valores constantes.

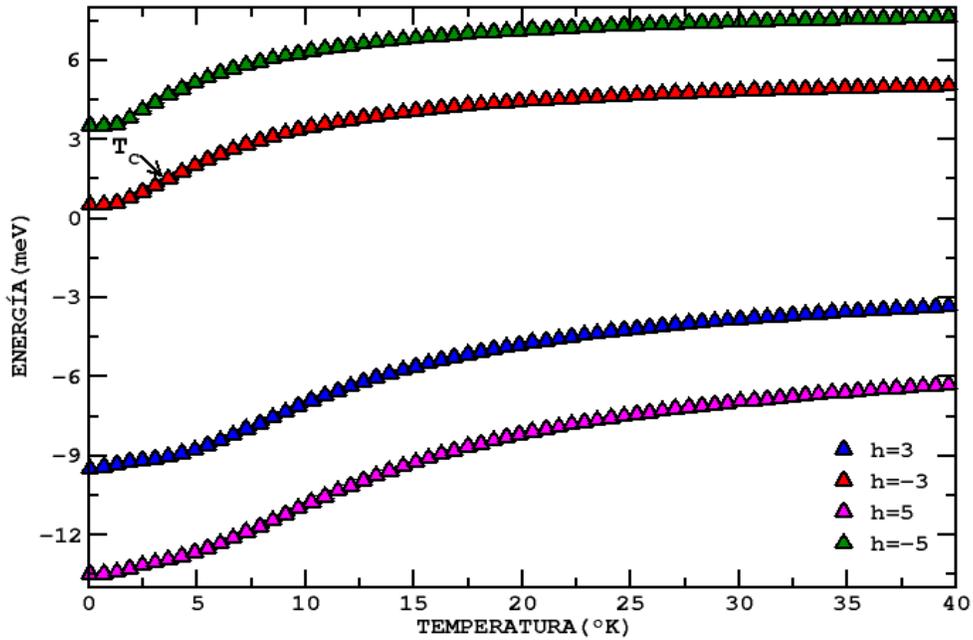


Figura 3.2: Energía por espín en función de la temperatura para diversos valores de  $h$ , con  $J_1 = 1$ ,  $D_s = -0.5$  y  $D_Q = 4$ .

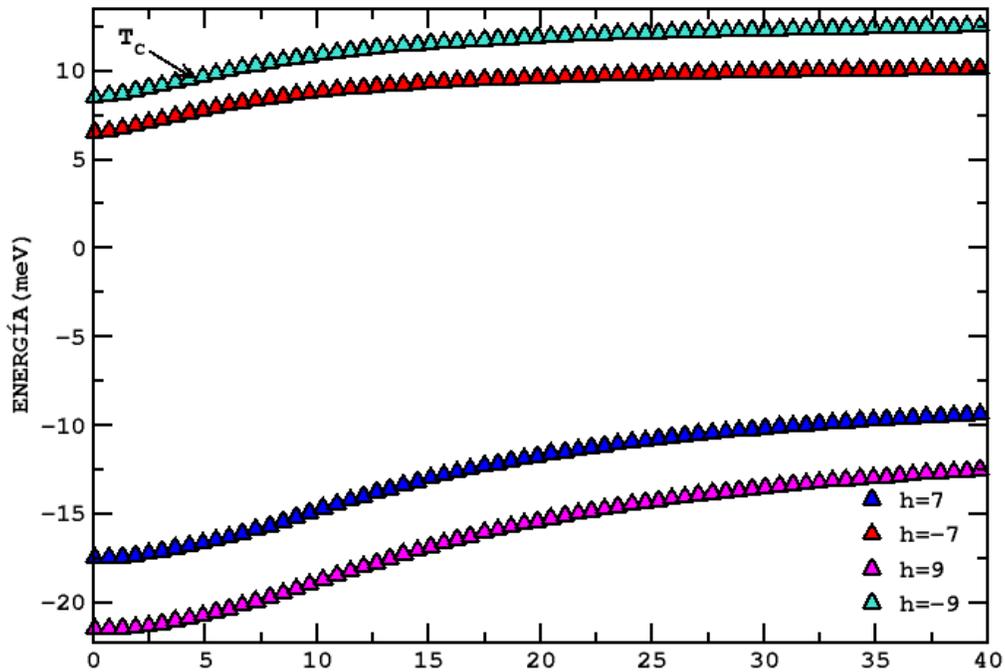


Figura 3.3: Energía por espín en función de la temperatura para diversos valores de  $h$ , con  $J_1 = 1$ ,  $D_s = -0.5$  y  $D_Q = 4$ .

En la figura 3.4 se establece el comportamiento de la energía de estado base del ferromagneto de espines  $S = 3$  y  $Q = 1$  con relación al campo magnético externo.

Observamos que para  $h < 0$  en el intervalo  $-9 \leq T \leq -3$  la energía decrece positivamente tomando su máximo valor de 8.5 cuando el campo vale  $h = -9$ . Mientras que en el intervalo  $-1 \leq T \leq -9$  crece positivamente en valor absoluto, tomando el valor máximo  $|-21.5|$  cuando el campo vale  $h = 9$ .

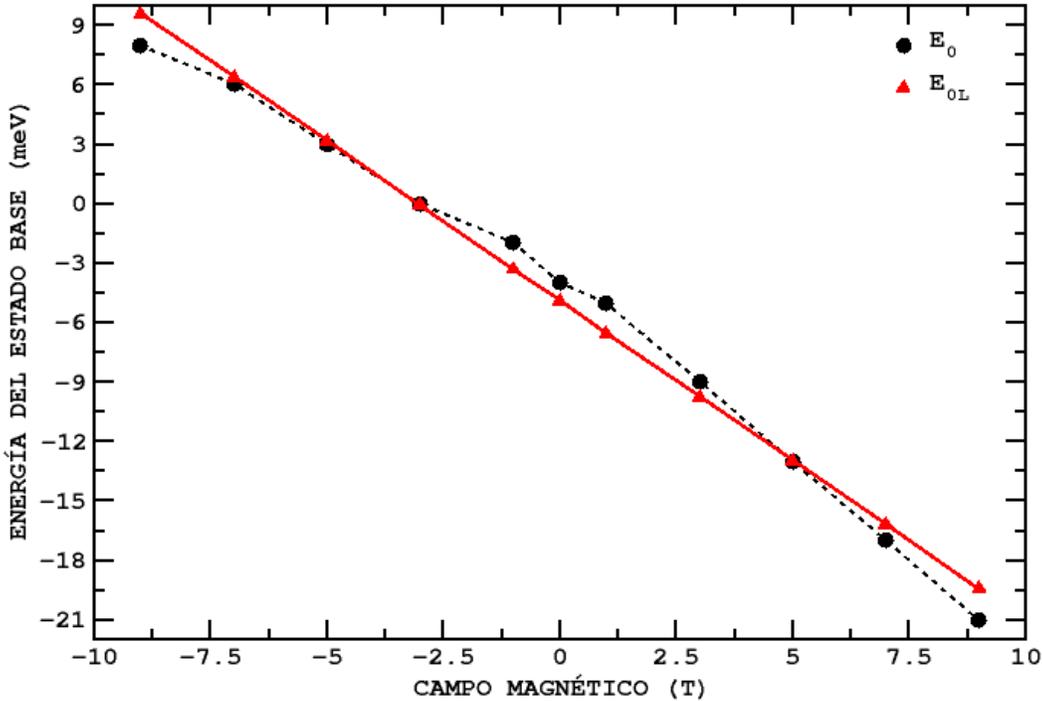


Figura 3.4: Energía de estado base  $E_0$  en función del campo magnético  $h$ , con  $J_1=1$ ,  $D_s = -0.5$  y  $D_Q = 4$ .  $E_{0L}$  representa la linealización de la curva  $E_0$ .

### 3.3.2 Efecto de $h$ sobre el calor específico $C$

En este caso consideramos las fluctuaciones de energía en el ferromagneto a través del comportamiento del calor específico variando con la temperatura, como función respuesta termodinámica de la energía. Las gráficas de calor específico mostradas en las figuras 3.5 y 3.6 indican que la temperatura crítica, estimada en el máximo de las curvas, se incrementa con  $h \geq 0$  y los picos se desplazan a la región de alta temperatura. En las figuras 3.7 y 3.8 para los campos  $h < 0$ , la diferencia radica en que la temperatura crítica decrece con el incremento del valor absoluto del campo  $h$ . En un sistema ideal e infinito las curvas de calor específico en función de la temperatura divergen en  $T_C$ , indicando una transición de fase de segundo orden desde una fase ferromagnética a una fase paramagnética y desordenada, en la cual los espines de la red se orientan en forma azarosa, presentando una dirección no definida. Un cálculo más cuidadoso de la temperatura crítica requerirá un análisis de escala de tamaño finito que está más allá del alcance de este trabajo, donde estamos principalmente interesados en el comportamiento cualitativo del punto crítico.

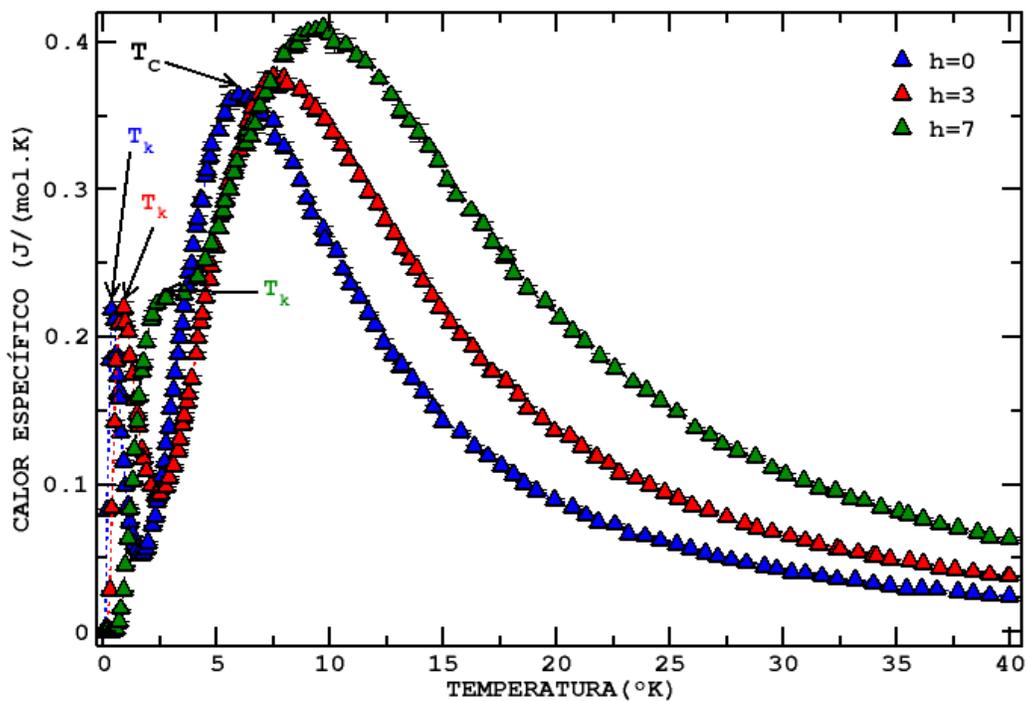


Figura 3.5: Calor específico en función de la temperatura para diferentes valores de campos magnéticos positivos y cero.

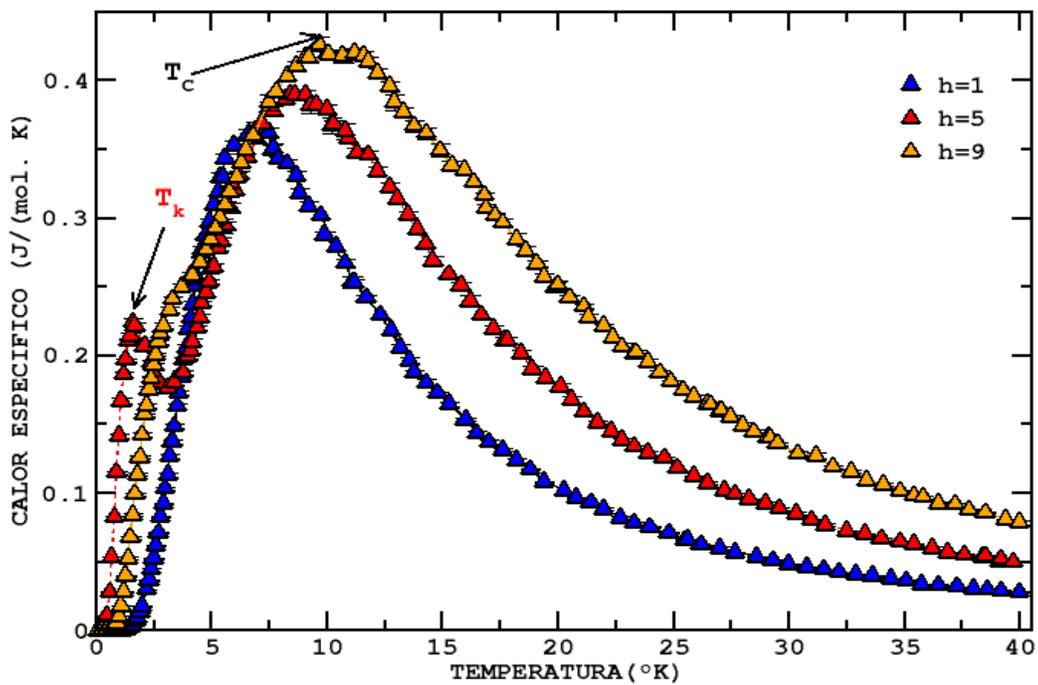


Figura 3.6 Calor específico en función de la temperatura para diferentes valores de campos magnéticos positivos.

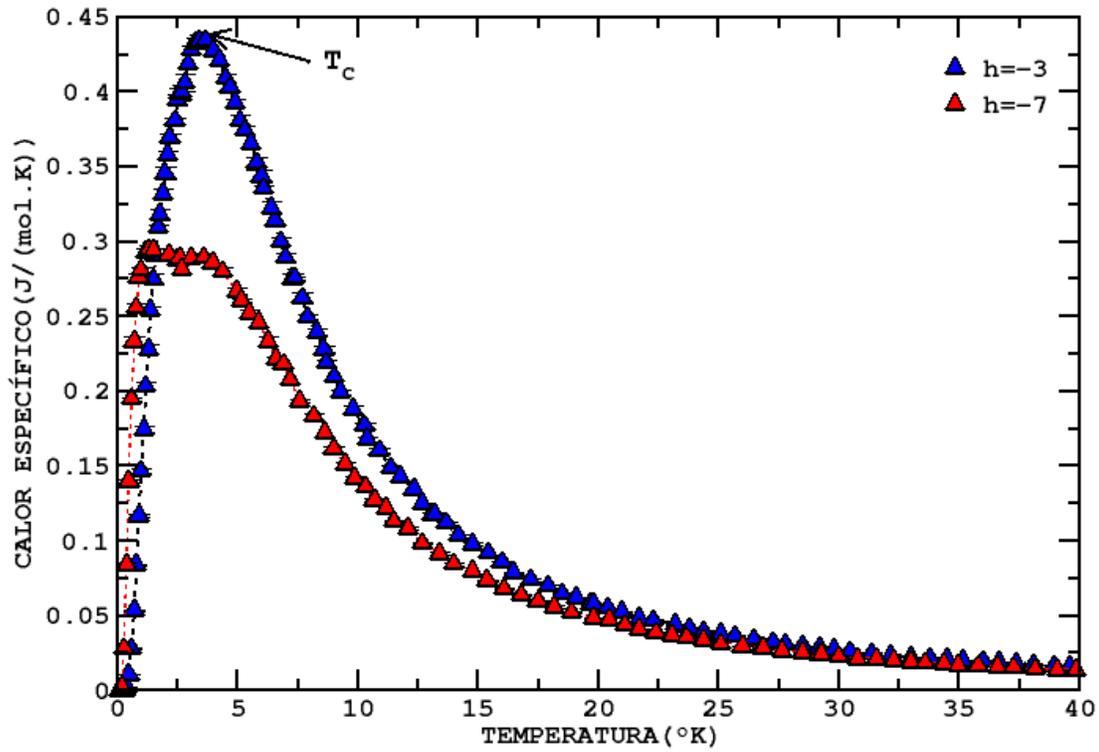


Figura 3.7: Calor específico en función de la temperatura para diferentes valores de campos magnéticos negativos.

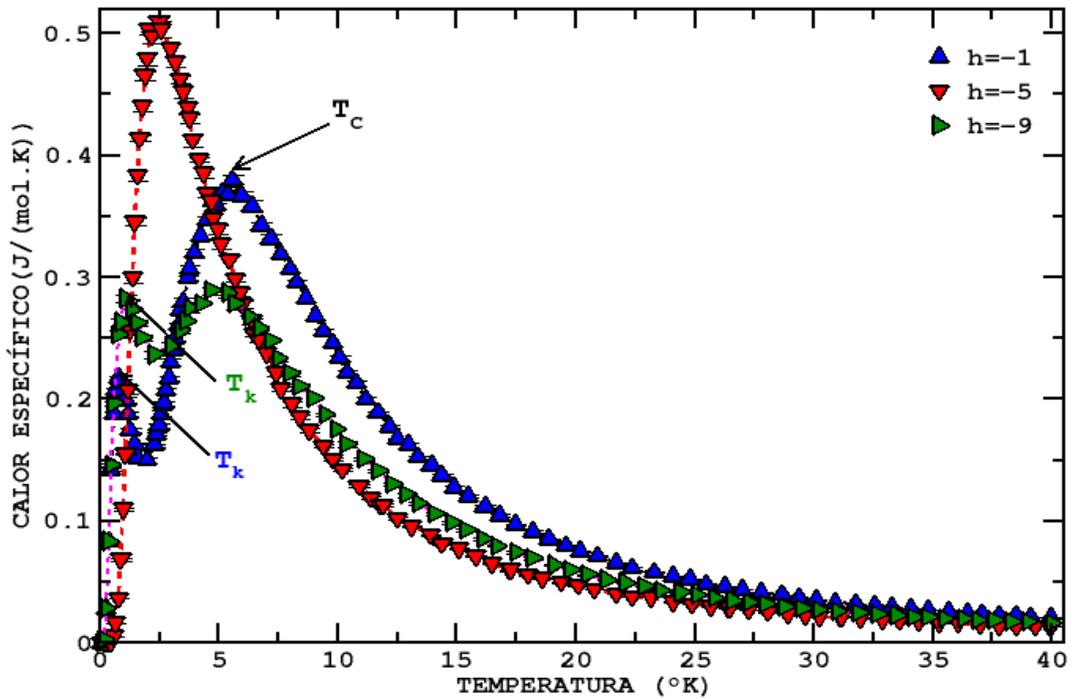


Figura 3.8: Calor específico en función de la temperatura para diferentes valores de campos magnéticos negativos.

El comportamiento termodinámico del calor específico en todas las curvas nos indica que  $C$  se incrementa con la temperatura hasta alcanzar su valor máximo en  $T = T_C$ , justamente en el punto que se presenta la transición de fase continua o de segundo orden donde el sistema pasa a la fase desordenada. Para valores  $T > T_C$  el calor específico empieza a decrecer hasta que para temperaturas muy grandes tiende a valores constantes.

En la figura 3.5 se nota a temperaturas bajas la presencia de picos no críticos a temperaturas señaladas con  $T = T_k$  que incrementan su valor a medida que aumenta la intensidad del campo. Es posible que estos picos en  $T_k$  se deban a una reactivación térmica de los espines de la subred  $A$  de tipo  $S$ , la cual se desordena más rápido que la subred  $B$  debido al efecto del campo de anisotropía  $D_Q = 4$  que mantiene más alineados los momentos magnéticos tipo  $Q$ . Todo esto ocurre en las proximidades de los intervalos  $0 \leq T \leq 0.36$ ,  $0 \leq T \leq 0.92$  y  $0 \leq T \leq 2.6$  cuando  $h = 0$ ,  $h = 3$  y  $h = 7$  respectivamente. De igual manera en la figura 3.6 se muestra un pico no crítico en  $0 \leq T \leq 1.5$  cuando el campo vale  $h = 1$ , asimismo en la figura 3.8 la presencia de estos puntos se encuentra en los intervalos  $0 \leq T \leq 0.7$  cuando  $h = -1$  y  $0 \leq T \leq 0.92$  cuando  $h = -9$ .

### 3.3.3 Efecto de $h$ sobre las magnetizaciones $M_S$ , $M_Q$ y $M_T$

En esta sección se muestra el comportamiento de la magnetización total por espín y de las magnetizaciones de las subredes por sitio de red en función de la temperatura para los valores  $D_S = -0.5$ ,  $D_Q = 4$  y  $J_1 = 1$  con algunas variaciones del campo magnético  $h$ .

En la figura 3.9 analizamos los efectos de los campos de anisotropía  $D_S$  y  $D_Q$  sin considerar la interacción del sistema con el campo magnético externo  $h$  ( $h=0$ ). Podemos apreciar a bajas temperaturas, aproximadamente en el intervalo  $0 \leq T < 3.75$  que la subred de espines  $Q = 1$  mantiene una magnetización casi constante ( $M_Q = 1$ ), mientras que la magnetización de espines  $S = 3$  crece aproximadamente hasta  $M_S = 2.5$ . Este comportamiento se debe a la intensidad del campo cristalino  $D_Q = 4$ , el cual tiende a mantener la subred  $B$  con los momentos magnéticos alineados en su dirección. Mientras que la subred  $A$  es afectada por un campo cristalino de intensidad  $D_S = |-0.5|$ , lo que implica que los espines tipo  $S$  se alinean en esa dirección haciendo que se incremente la magnetización  $M_S$ . Para  $T > 3.75$  la energía térmica prevalece con mayor influencia en la subred  $B$ , ya que la magnetización  $M_Q$  empieza a decrecer de tal manera que para temperaturas muy grandes tiende a alcanzar el valor constante  $\approx 0.17$ . Este fenómeno nos indica que la subred  $B$  se desordena más rápido que la subred  $A$  con el incremento de la temperatura. Con respecto a la subred  $A$  para  $T > 3.75$  domina el efecto del campo cristalino  $D_S$  sobre la energía térmica puesto que la magnetización  $M_S$  mantiene un valor aproximadamente constante ( $\approx 2.5$ ). La grafica 3.9 también nos muestra que cuando el ferromagneto está en el estado base ( $T = 0$ ) la magnetización total  $M_T = 1.5$  se satisface en el estado base con la ecuación (3-6). En los dos intervalos antes mencionados se refleja la combinación de los comportamientos  $M_S$  y  $M_Q$ , para obtener la curva de  $M_T$ . Para grandes temperaturas  $M$  tiende aproximadamente a 1.32.

Seguidamente estudiaremos el caso para  $h$  distinto de cero para analizar sus efectos sobre las magnetizaciones. En la figura 3.10 se exhibe la influencia del campo magnético externo con valores negativos y cero sobre la magnetización total del ferromagneto tipo Ising de espines  $S = 3$  y  $Q = 1$ . A medida que se incrementa en valor absoluto el campo externo  $h$  la magnetización va decreciendo desde su estado base en  $T = 0$ , tal como se observa para  $h > |-3|$ . Los máximos de las curvas para  $h = 0, -1, -3$  que indican un orden de los momentos magnéticos debido a los campos de anisotropía, se ven afectados por la acción del campo  $h$ . Es decir, el campo externo desordena los espines en la red como se aprecia en las curvas para  $h = -5, -7, -9$  hasta el punto en que  $M_T = 0$  en el estado base para  $h = -9$ . Como se esperaba para grandes temperaturas y los diversos valores de  $h$ , cada curva tiende a un valor constante. Cuando analicemos el comportamiento de  $M_S$  y  $M_Q$  detallaremos el fenómeno del ordenamiento de los espines en las subredes **A** y **B**.

La figura 3.11 nos muestra las curvas de  $M_T$  como función de la temperatura para valores de  $h \geq 0$ . Con respecto a la figura 3.10 para  $h < 0$ , en la figura 3.11 se aprecia el incremento de la magnetización en cada una de las curvas a medida que  $h$  se incrementa positivamente. Asimismo, para cada valor de  $h$  la magnetización decrece con el incremento de la temperatura y a diferencia de la figura 3.10 el efecto de invertir la dirección del campo externo  $h$  ( $h > 0$ ) hace que se destruyan los máximos en las curvas para  $h = -1, -3$  y que se incrementen los valores de  $M_T$  en el estado base ( $T = 0$ ). Al igual que en el caso anterior para grandes temperaturas  $M_T$  tiende a valores constantes en cada una de las curvas.

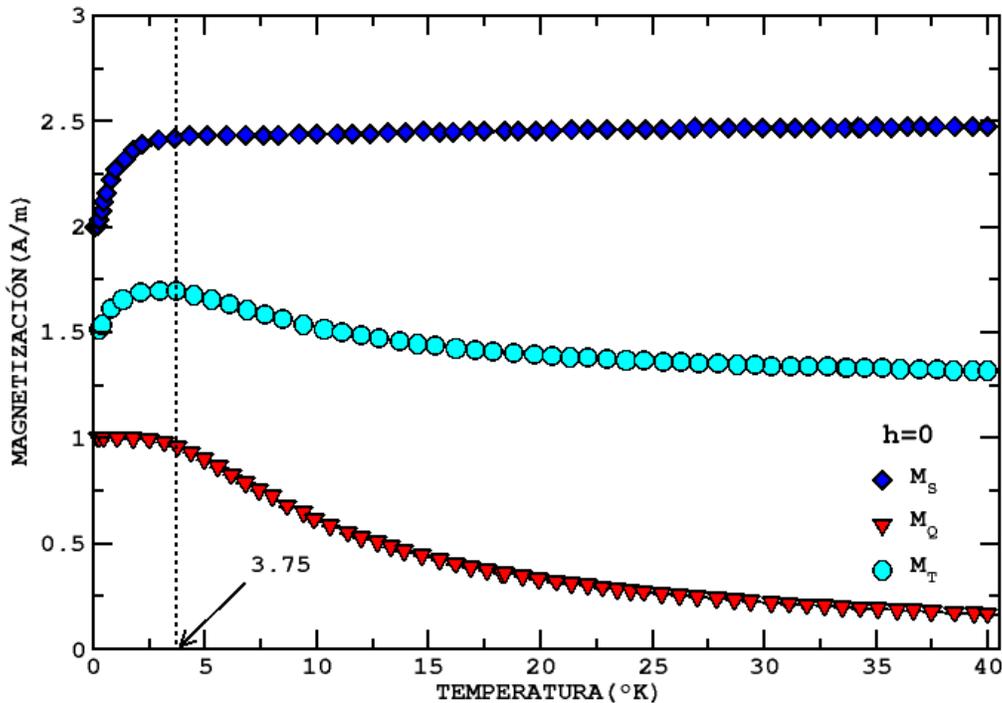


Figura 3.9: Comportamiento de la magnetización total y de las subredes por espín  $M_T$ ,  $M_S$  y  $M_Q$ , para  $h = 0$ ,  $D_Q = 4$  y  $D_S = -0.5$ .

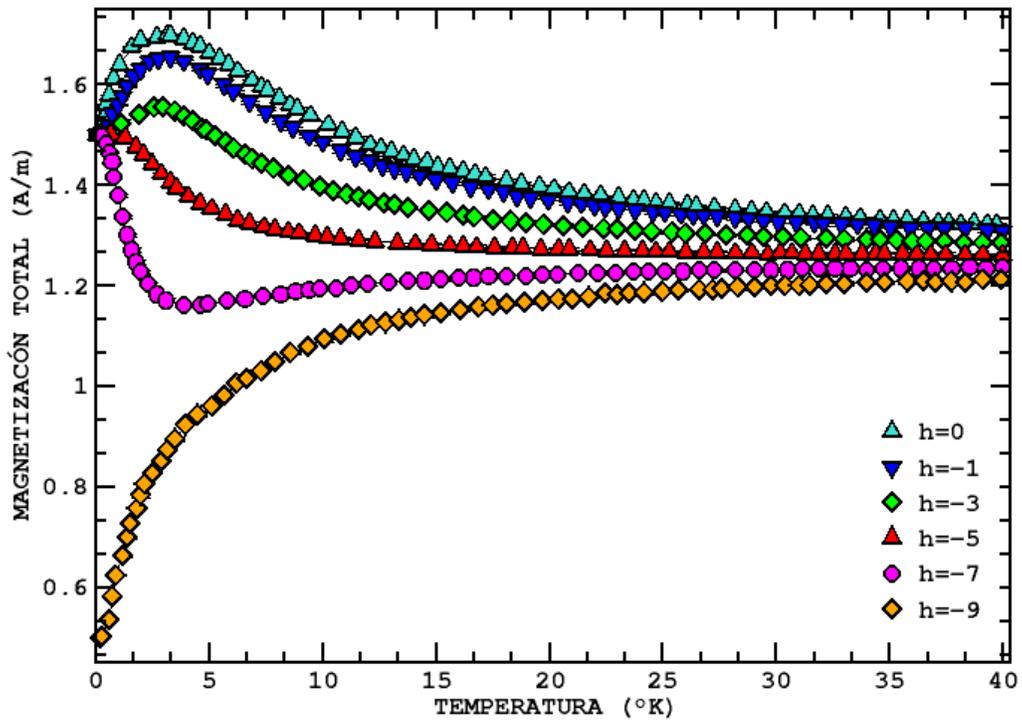


Figura 3.10: Dependencia de la magnetización total por espín con la temperatura para  $h \leq 0$ , con  $D_Q = 4$  y  $D_S = -0.5$ .

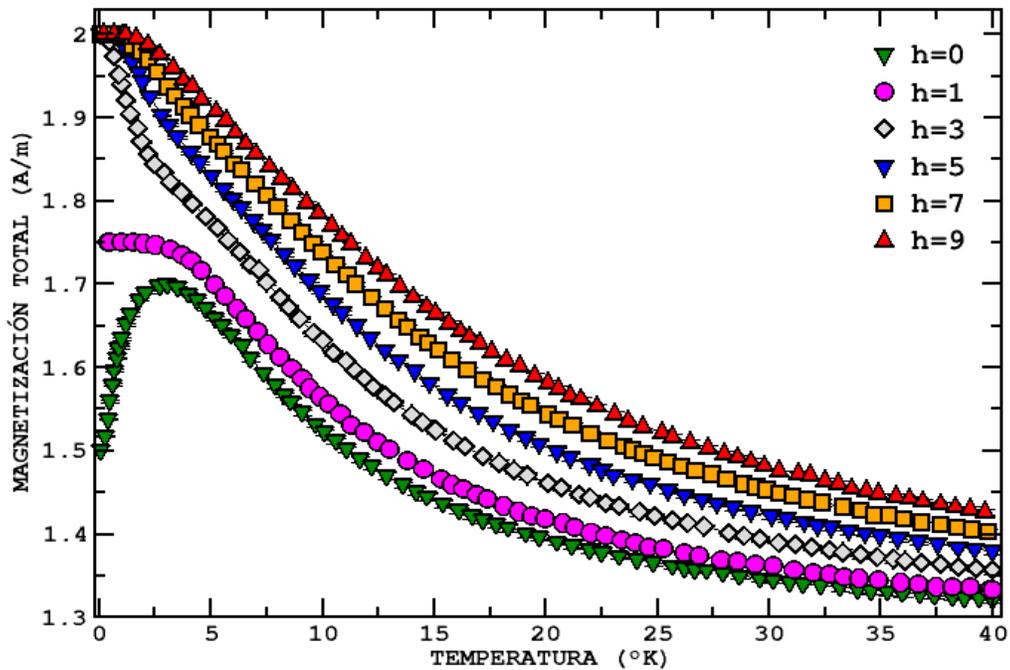


Figura 3.11 Dependencia de la magnetización total por espín con la temperatura para  $h \geq 0$ , con  $D_Q = 4$  y  $D_S = -0.5$ .

El efecto del campo magnético externo sobre el comportamiento de las magnetizaciones de las subredes  $M_S$  y  $M_Q$  se detallan en las figuras 3.12 y 3.13 respectivamente. En cada una de las curvas de la figura 3.12 se puede apreciar para  $h > 0$  que la magnetización  $M_S$  decrece desde su valor de saturación en  $T = 0$  con el incremento de la temperatura, hasta alcanzar un valor constante para temperaturas grandes aproximadamente igual a 2.5(A/m). Cuando se aplica al ferromagneto el campo externo invertido ( $h < 0$ ) notamos que, en contraste al efecto de campos positivos, ahora la magnetización  $M_S$  crece paulatinamente con el incremento de la temperatura hasta el valor constante 2.5 (A/m). Cabe destacar que el incremento negativo de la intensidad del campo (o en su defecto el incremento del valor absoluto para ( $h < 0$ )) desordena más los espines de la subred **A** como se puede comparar para  $h = -1, -7$  en las figuras 3.12 (a) y (d). En estos casos la curva  $h = 0$  sirve de parámetro comparativo para el análisis de las orientaciones de los espines en la red. Por ejemplo, para  $h = -1$  los espines se orientan paralelamente al campo y predomina el efecto del campo cristalino  $D_S = |-0.5|$ . Mientras que en la curva de  $M_S$  para  $h = -7$  predomina el efecto del campo y la energía térmica  $k_B T$  en el desorden de los espines, reduciendo los valores de la magnetización. Un aspecto interesante que se nota en las curvas de la figura 3.12 es la simetría especular que presentan las curvas de  $h > 0$  y  $h < 0$  con respecto a  $h = 0$ , aproximadamente a partir del intervalo de temperaturas  $T \geq 10$  (señalado en las figuras con líneas verticales punteadas). Retomando la figura 3.13 para el comportamiento de  $M_Q$ , podemos observar que cuando  $h > 0$  se incrementa, los momentos magnéticos de la subred **B** tienden a alinearse paralelamente con el campo externo. Esta situación se ve reflejada en las figuras 3.13 (a) y (d) para  $h = 1$  y  $h = 7$  respectivamente. Para  $h = 1$  la curva de  $M_Q$  desciende más rápido que para  $h = 7$ , lo cual implica que en este momento los espines empiezan a reordenarse en la dirección de  $h$ , mientras que para  $h = 7$  existe un mayor orden de los espines en la red, ya que están más alineados con respecto a la dirección del campo externo. Lo anterior también se corrobora al analizar el intervalo de temperaturas  $0 \leq T \leq 5$  para las figuras 3.13 (a) y (d) en dicho intervalo, se observa un mayor orden para  $h = 7$  ya que la magnetización permanece con el valor constante  $M_Q = 1$ . De igual manera en la curva para  $h = 1$  por descender más rápido el valor de  $M_Q$  a altas temperaturas es menor ( $\approx 0.2$ ) que el valor de  $M_Q$  para  $h=7$  ( $\approx 0.3$ ). Cuando el sistema es sometido a campos negativos (cambio de dirección de  $h$ ) ocurre un fenómeno contrario al observado para campos positivos. Es decir, cuando se incrementa negativamente el campo magnético las curvas de  $M_Q$  descienden más rápidamente, indicando un desorden o direcciones aleatorias en los momentos magnéticos de la subred **B**. Lo anterior indica que prevalece en el sistema la energía térmica  $k_B T$  con el incremento de la temperatura. Además, se nota que para grandes temperaturas la magnetización  $M_Q$  tiende a valores constantes diferentes en cada caso. La influencia del campo magnético sobre el ferromagneto es notoria para valores grandes del módulo de  $h$  ( $h = |5|, |7|, |-5|, |-7|$ ), lo cual destruye la simetría especular con respecto a  $h = 0$  observadas para  $h = 1, 3$  en las figuras 3.13 (a) y (b).

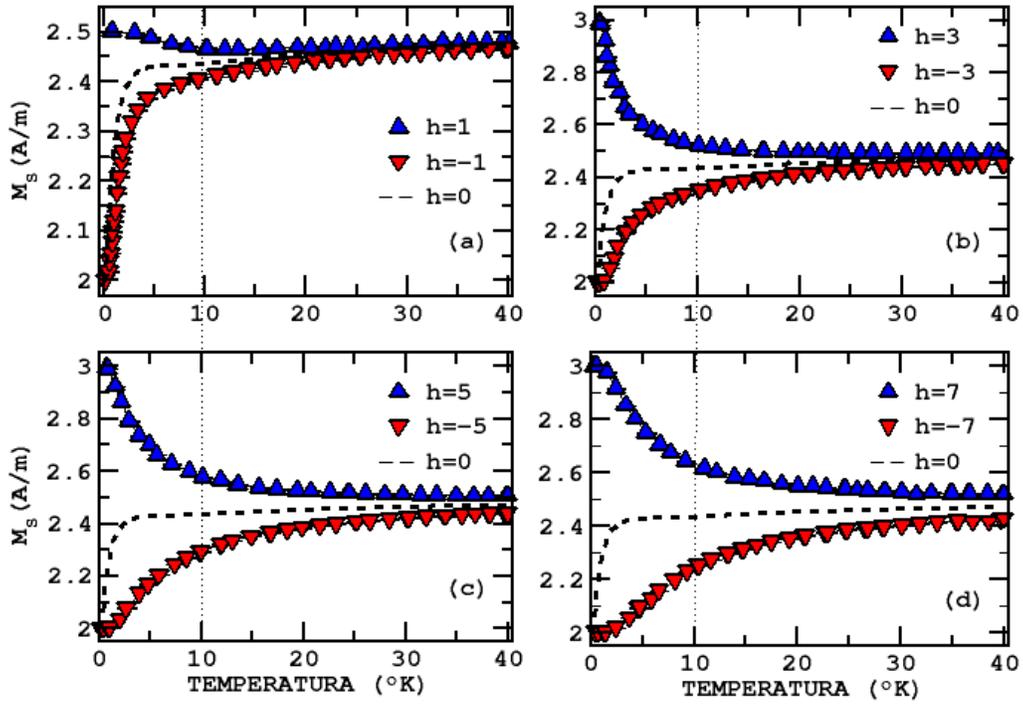


Figura 3.12: Comportamiento de la magnetización por espín de la subred A para  $D_S = -0.5$  y  $D_Q = 4$ , con variaciones del campo  $h$ .

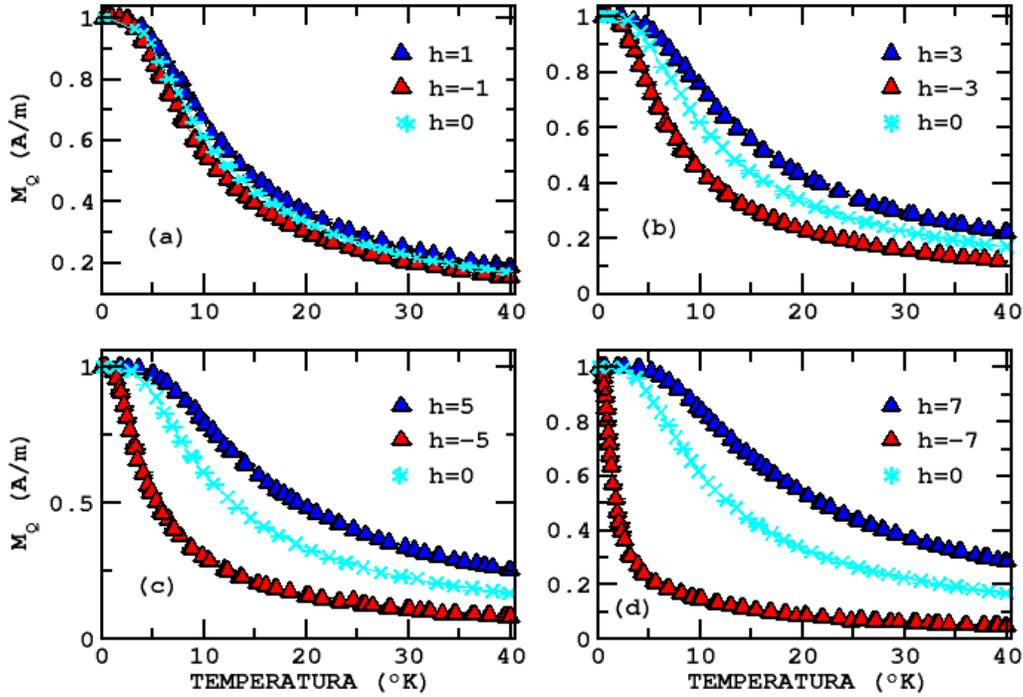


Figura 3.13: Comportamiento de la magnetización por espín de la subred B para  $D_S = -0.5$  y  $D_Q = 4$ , con variaciones del campo  $h$ .

### 3.3.4 Efecto de $h$ Sobre la Susceptibilidad Magnética $\chi_T$

En la figura 3.14 Analizamos las variaciones térmicas de la susceptibilidad magnética total por espín para diversos valores del campo magnético externo  $h$ . Estas curvas representan las fluctuaciones de la magnetización total del ferromagneto en estudio, por lo cual  $\chi_T$  representa la función respuesta de la magnetización total. De las curvas de  $\chi_T$  en la figura 3.14 se deduce que la susceptibilidad se incrementa gradualmente con la temperatura hasta alcanzar un máximo en el punto de transición  $T = T_c$  y luego decrece a valores distintos de cero para grandes temperaturas. Como esperábamos para los parámetros del Hamiltoniano en todos los casos de la figura 3.14, los valores de las temperaturas en los máximos de las curvas tienen una excelente concordancia con aquellos estimados en las gráficas de calor específico para las temperaturas críticas. Para  $h = 5$  se puede apreciar en la figura 3.14(b) un pico no crítico para bajas temperaturas en  $T = T_k$ . Este fenómeno también se presentó para el calor específico (ver figura 3.6) como función respuesta de las fluctuaciones de energía en la misma región de temperaturas. Como lo habíamos explicado, estos picos no críticos en  $T = T_k$  son producto del reordenamiento térmico de los espines de la subred A que se desordena más rápidamente por efectos de los campos cristalinos y magnéticos.

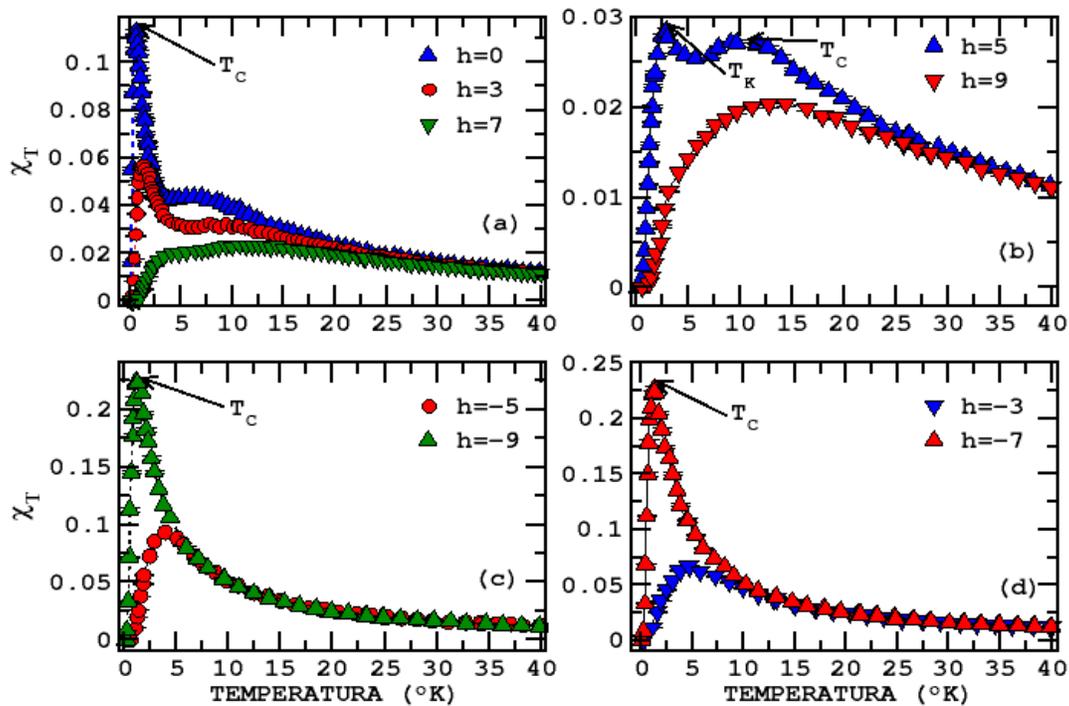


Figura 3.14 : Dependencia de la susceptibilidad magnética total por espín con la temperatura y el campo magnético longitudinal externo  $h$ .

Para concluir el análisis del comportamiento de la susceptibilidad magnética en la figura 3.15 graficamos  $\chi_T$  para  $h = 1$  y  $h = -1$ . En la figura 3.15 (a) se presenta un máximo para bajas temperaturas en  $\chi_T \approx 1.2$ . El incremento de temperatura en esta curva implica un decrecimiento abrupto de la susceptibilidad hasta alcanzar el valor cero. Con respecto a la figura 3,15 (b) para  $h = -1$ , a bajas temperaturas existe un ordenamiento ferromagnético,

por efecto del campo magnético en  $T = T_k$ . En el segundo máximo crítico en  $T = T_c$  el sistema pasa de la fase ferromagnética a la fase paramagnética. En este tipo de curvas no se observa claramente la temperatura de transición  $T_c$  porque es removida por el campo magnético externo. Este fenómeno se puede apreciar mejor en las curvas de la magnetización del sistema mostradas en las figuras 3.9-3.13.

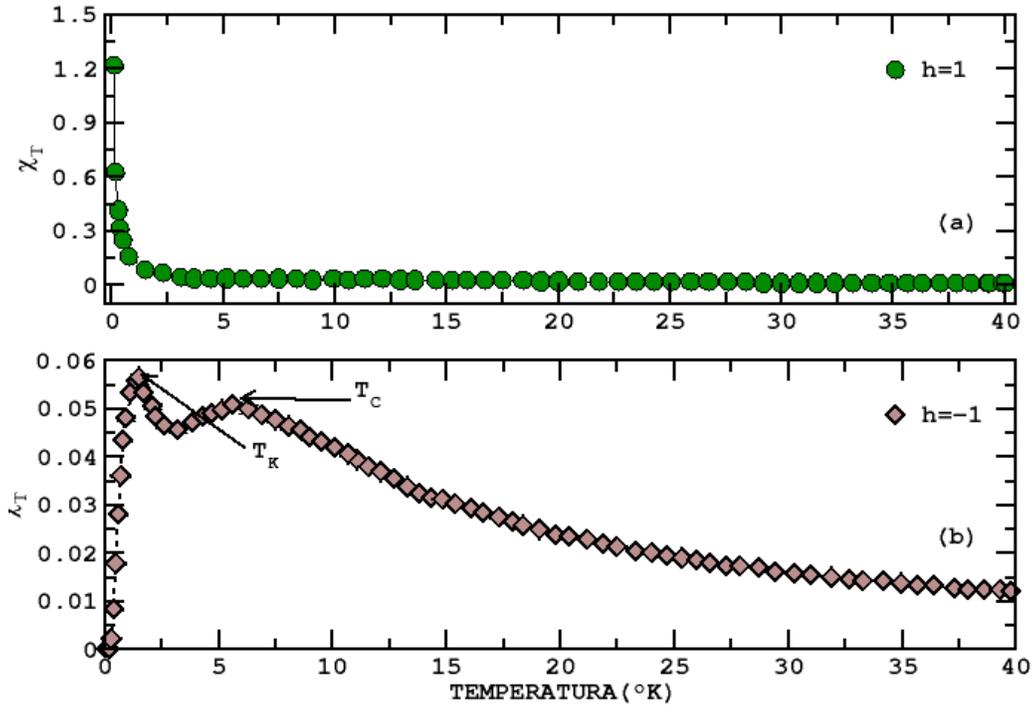


Figura 3.15: Dependencia de la susceptibilidad magnética total por espín con la temperatura y el campo magnético longitudinal externo  $h$ .

### 3.3.5 Efecto de $h$ Sobre la Temperatura Crítica $T_c$

El comportamiento crítico del sistema ferromagnético de espines  $S = 3$  y  $Q = 1$  se resume en la figura 3.16. Se puede apreciar una fuerte dependencia de la temperatura crítica  $T_c$  con respecto al campo magnético externo  $h$ . A medida que se incrementa el campo para  $h \geq 0$  la temperatura crítica se incrementa. Para  $h < 0$ ,  $T_c$  también crece con el decrecimiento del valor absoluto de  $h$ . Esta situación nos indica que el incremento de la temperatura crítica es independiente de la dirección del campo magnético externo. Por encima de la curva de temperatura crítica se encuentra la fase paramagnética (FPM) donde el sistema está completamente desordenado y los espines se orientan al azar, formando algunas veces pequeños “clusters” que no contribuyen a una magnetización neta. En la fase FPM ( $T > T_c$ ) domina sobre el sistema la energía térmica  $k_B T$ . Por debajo de la curva de  $T_c$  se encuentra la fase ferromagnética (FFM) en la cual el sistema está ordenado y los espines se orientan en una dirección privilegiada por efectos de los parámetros de interacción del Hamiltoniano definido en la ecuación (3-1). En esta fase existe una magnetización espontánea para  $T < T_c$  aun en la ausencia de campo magnético externo, tal como se aprecia

en la figura 3.9. La línea punteada nos indica la linealización de la curva  $T_C$  Vs  $h$ , y la línea continua representa el seguimiento de los puntos.

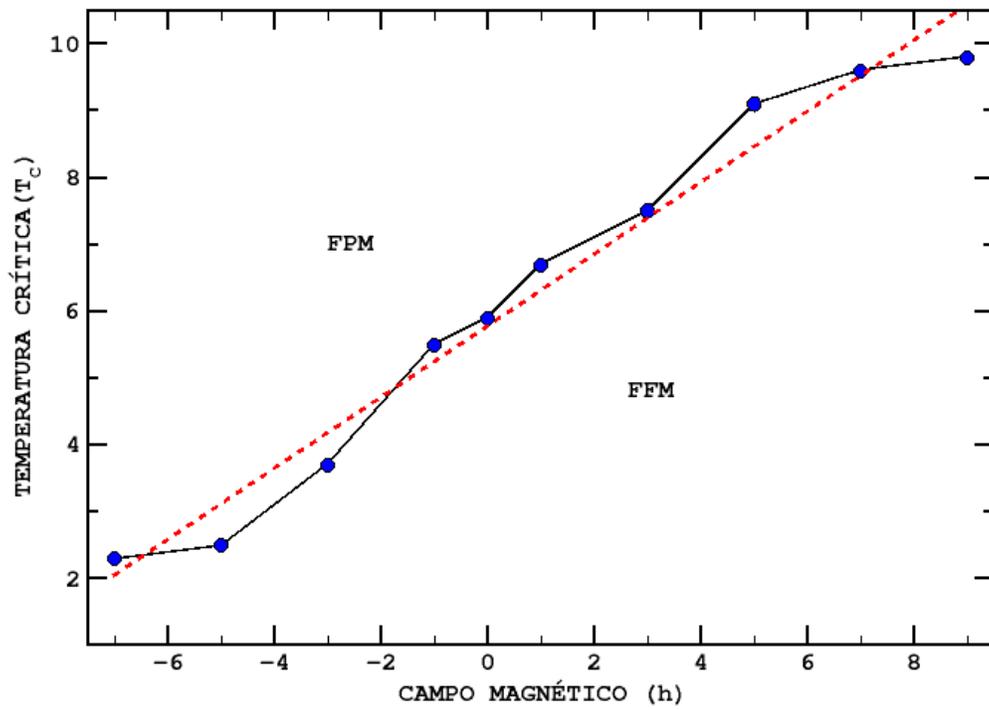


Figura 3.16: Dependencia de la temperatura crítica del sistema respecto a la variación del campo magnético aplicado  $h$ .

## Capítulo 4

### Conclusiones

En resumen, hemos analizado las propiedades termomagnéticas de un sistema ferromagnético tipo Ising de espines  $S = 3$  y  $Q = 1$  estructurados en una red cuadrada bipartita de subredes  $A$  y  $B$ . Se estudió el efecto de un campo magnético externo  $h$  sobre las propiedades físicas del sistema, mediante los diagramas de fase a temperatura finita de la energía, las magnetizaciones, el calor específico y la susceptibilidad magnética total por sitio de red, usando simulaciones Monte Carlo. El Hamiltoniano que define al sistema tiene interacciones de intercambio a primeros vecinos ( $J_1$ ) de campos cristalinos  $D_Q$  y  $D_S$  y un campo magnético externo  $h$ . Nuestros resultados arrojaron las siguientes conclusiones:

- La energía del sistema se incrementa con el incremento de la temperatura. La energía de estado base del ferromagneto decrece con el incremento del campo magnético externo.
- Para  $h \geq 0$  los máximos picos del calor específico se desplazan hacia altas temperaturas indicando un incremento de  $T_C$ . Para  $h < 0$   $T_C$  decrece con el incremento de  $|h|$ .
- Las curvas del calor específico presentan picos no críticos a bajas temperaturas, como consecuencia del reordenamiento térmico de los espines en las subredes por efectos de los campos cristalinos y la interacción de canje dados en el Hamiltoniano de interacción.
- Cuando el sistema no interactúa con el campo magnético externo, para bajas temperaturas la subred de espines tipo  $S$  ( $A$ ) se desordena más rápido que la subred de espines tipo  $Q$  ( $B$ ) debido al efecto de  $D_Q$  en la subred  $B$ . Para altas temperaturas ocurre el proceso contrario por la influencia de la energía térmica  $k_B T$ .
- A medida que se incrementa en valor absoluto el campo externo  $h$  la magnetización va decreciendo desde su estado base en  $T = 0$ . Asimismo, para cada valor de  $h$  la magnetización decrece con el incremento de la temperatura.
- Las curvas de las magnetizaciones de las subredes para  $h > 0$  y  $h < 0$  presentan simetría especular con respecto a la curva para  $h = 0$ .
- La susceptibilidad magnética crece gradualmente con el incremento de la temperatura hasta su máximo valor en  $T = T_C$  y luego decrece para valores constantes a altas temperaturas.

- La temperatura crítica del ferromagneto depende fuertemente de la intensidad del campo magnético externo, es decir, se incrementa con  $h$ .  $T_C$  es independiente de la dirección del campo magnético externo.

## Referencias Bibliográficas

- [1] The Discovery of Giant Magnetoresistance, compiled by the Class of Physics of The Royal Swedish Academy of Sciences. Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2007.
- [2] N. Sounderya, Y. Zhang, Use of Core/Shell Structured Nanoparticles for Biomedical Applications, Recent Pat. Biomed. Eng. 1 (2008) 34.
- [3] J. B. Parkinson, D. J. Farnell, An Introduction to Quantum Spin Systems. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, 2010.
- [4] F. Schwabl. Statistical Mechanics. 3rd Edition, Physik-Department Technische Universität München, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2006.
- [5] M. Kuz'min, Shape of Temperature Dependence of Spontaneous Magnetization of Ferromagnets: Quantitative Analysis. Physical review letters. 94 (2005) 107-204.
- [6] A. Jabar, R. Masrou, A. Benyoussef, M. Hamedoun, Monte Carlo study of alternate mixed spin-5/2 and spin-2 Ising ferrimagnetic system on the Bethe lattice, J. Magn. Magn. Mater. 397 (2016) 287–294.
- [7] B. Boughazi, M. Boughrara, M. Kerouad, J. Magn. Magn. Mater. 354 (2014) 173.
- [8] Q. Zhang, G. Wei, Y. Gu, Phys. Status Solidi B. 242 (2005) 4–924.
- [9] J. Strecka, J. Cisárová, Order-from-disorder effect in the exactly solved mixed spin-(1/2, 1) Ising model on fully frustrated triangles-in-triangles lattices Physica A. 392 (2013) 5633-5643.
- [10] D. Suess, L. Breth, J. Lee, M. Fuger, Ch. Vogler, F. Bruckner, B. Bergmair, T. Huber, J. Fidler, T. Schrefl, Calculation of coercivity of magnetic nanostructures at finite temperatures. Physical Review B. 84 (2011) 224-421.
- [11] R. Masrou, A. Jabar, A. Benyoussef, M. Hamedoun, Magnetic properties of cluster dendrimers of core/shell with mixed spins  $\sigma = 3/2$  and  $s=2$ : A Monte Carlo study, Chem. Phys. Lett. 691 (2018) 199–205.
- [12] A. Jabar, R. Masrou, Magnetic properties of mixed spin-5/2 and spin-2 Ising model on a decorated square lattice: A Monte Carlo simulation, Physica A. 515 (2019) 270–278.
- [13] Ş. Numan, A. Salih, P. Yasin, E. Recai, Effective distance of a ferromagnetic trilayer Ising nanostructure with an ABA stacking sequence. Physica A. Statistical Mechanics and its Applications. 434 (2015) 194-200.
- [14] R. M'nassri, N. Boudjada, A. Cheikhrouhou, 3D Ising ferromagnetic characteristics and magnetocaloric study in  $\text{Pr}_{0.4}\text{Eu}_{0.2}\text{Sr}_{0.4}\text{MnO}_3$  manganite. Journal of Alloys and Compounds. 640 (2015) 183-192.

- [15] Y. Unjong, Critical temperature of the Ising ferromagnet on the fcc, hcp, and dhcp lattices. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*.419 (2015) 75-79.
- [16] V. A. L'vov, A. Kosogor, Inverse magnetocaloric effect in the solids undergoing ferromagnetic - antiferromagnetic phase transition: Landau theory applied to Fe-Rh alloys, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. (2020) 167-269.
- [17] B. Touria, S. Mohammed, The transverse spin-1 Ising model with random interactions. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 321 (2009) 17-24.
- [18] Ü. Temizer, K. Mustafa, O. Canko, Dynamic compensation temperature in the kinetic spin-1 Ising model in an oscillating external magnetic field on alternate layers of a hexagonal lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*.321. (2009) 2999-3006.
- [19] M. Keskin, O. Canko, E. Kantar, The Glauber dynamics for a spin-1 metamagnetic Ising system with bilinear and biquadratic interactions. *Physics Letters A*. 373. (2009) 2201-2209.
- [20] M. Keskin, M. Ertaş, O. Canko , Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams in the kinetic mixed spin-1 and spin-2 Ising system in an oscillating Magnetic Field, *Phys. Scr.* 79 (2009) 025-501.
- [21] G. Wei, Y. Gu, J Liu, Mean-field and Monte Carlo studies of a mixed spin-1 and spin-2 Ising system with different anisotropies, *Phys. Rev. B* 74 (2006) 024-422.
- [22] J. Mazo Zuluaga Propiedades magnéticas y efectos de tamaño en nanoestructuras de magnetita: simulación Monte Carlo. Tesis Doctoral, Universidad de Antioquia (2008).
- [23] J.F. Scott. *Science, Applications of Modern Ferroelectrics*, 315 (2007) 954-959.
- [24] M. Grafoute, Etude des propriétés structurales et modélisations de poudres nanostructures de Fe obtenues par broyage mécanique. Tesis Doctoral, Universidad de Maine-Francia (2004).
- [25] E. P. Wohlfarth, *Ferromagnetic materials a handbook on the properties of magnetically ordered substances*, North-Holland (1999).
- [26] D. J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*, 2nd ed. Prentice Hall (1999).
- [27] J. H. Van Vleck, A Survey of the Theory of Ferromagnetism, *Rev. Mod. Phys.*, 17 (1945) 27.
- [28] D. R. Askeland, W. J. Wright “Ciencia e Ingeniería de Materiales”, Ed. Cengage Learning Editores S.A. de C.V, (2017), Pp.733.
- [29] S. Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*, Clarendon Press, Oxford (1997).
- [30] D. R. Askeland, “La Ciencia e Ingeniería de los Materiales”, Ed. Iberoamericana, año 1985, Pp.437-439.
- [31] B. Witold, “Introducción a la ciencia de los materiales”, Ed. Limusa, año 1981, Pp 425.

- [32] G.T. Barkema, M.E.J. Newman. Monte Carlo methods in statistical physics. Oxford University Press, 2001.
- [33] K. Huang. Statistical mechanics. 1963
- [34] Ch. Kittel, D.F. Holcomb, «Introduction to solid state physics», American Journal of Physics 35.6 (1967) 547-548.
- [35] E. Ising. «Beitrag zur theorie des ferromagnetismus». En: Zeitschrift für Physik 31.1 (1925), págs. 253-258.
- [36] J. M. Yeomans, Statistical mechanics of phase transitions. Clarendon Press, 1992.
- [37] L. Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an orderdisorder transition. Phys. Rev., Vol 65. (1944) págs. 117–149.
- [38] M.S. Bhattacharjee, A. Khare, Fifty years of the exact solution of the two- dimensional Ising model by Onsager (Institute of Physics, Sachivalaya Marg, India; 2008).
- [39] C. N. Yang, The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. Physical Review, Vol 85. (1952) pág. 808.
- [40] L. Angélica and Gelover-Santiago. Simulación del modelo de Ising con el método de Monte Carlo. UNAM, (2005).
- [41] F. Schwabl. Statistical Mechanics. 3rd Edition, Physik-Department Technische Universität München, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2006.
- [42] A.D. Bruce, R.A. Cowley. «Structural phase transitions III. Critical dynamics and quasi-elastic scattering». En: Advances in Physics 29.1 (1980) 219-321.
- [43] G.T. Barkema, M.E.J. Newman. Monte Carlo methods in statistical physics. Oxford University Press, 2001.
- [44] E. Restrepo Parra. Simulación Monte Carlo de propiedades magnéticas y de transporte en sistemas de super-redes del tipo (FM/AFM)n. Tesis doctoral. Universidad Nacional de Colombia (2010).
- [45] M.E.J. Newman, G.T. Barkema, Monte-Carlo Methods in Statistical Physics. Clarendon Press-Oxford (1999).
- [46] K. Binder, D.W. Heermann, Monte-Carlo Simulation in Statistical Physics. SpringerVerlag, Alemania (1988).