



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA  
FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**ESTUDIO TERMOMAGNÉTICO DE UN  
FERRIMAGNETO TIPO ISING DE ESPINES MIXTOS**  
 $S = 3/2$  Y  $\sigma = 5/2$

TRABAJO DE GRADO PRESENTADO A LA UNIVERSIDAD DE  
CÓRDOBA POR:

PABLO CESAR PONNEFZ DURANGO

Como requisito para optar al título de:

FÍSICO

Dirigido por:  
Dr. NICOLÁS DE LA ESPRIELLA VÉLEZ

Octubre, 2020

# Dedicatoria

Finalizado este trabajo de grado y más que eso, alcanzada una meta tan importante en mi vida, no tengo nada más que decir que todo lo logrado se lo dedico a mi familia, por todos los sacrificios realizados para que mi paso por la universidad fuese posible y a todas aquellas personas que de una u otra forma me han ayudado a finalizar mi carrera universitaria con éxito.

*Siempre debemos aspirar a ser mejores de lo que somos ahora.*

# Agradecimientos

Al finalizar este trabajo quiero utilizar este espacio para agradecer las siguientes personas y/o entidades por haber contribuido directa o indirectamente a que este se llevara a cabo con éxito:

- A mi familia, por la comprensión y cariño recibido durante todas las horas dedicadas a realizar el trabajo.
- Mi total agradecimiento a mi director de trabajo, el Dr. Nicolás De La Espriella Vélez, por la dedicación y apoyo que ha brindado, por el respeto a mis sugerencias e ideas y por la dirección que ha facilitado a las mismas. Gracias por la confianza ofrecida desde que llegué a esta carrera.
- Infinitas gracias a todos mis profesores de la carrera, ya que sin su ayuda no estaría logrando esta meta tan importante.
- A la universidad de Córdoba, por haber permitido que me formara profesionalmente.
- Y por último quisiera agradecer a todos mi amigos en la carrera, ya que sin ellos mi instancia en la universidad no hubiese sido tan placentera como lo fue.

*¡Muchas gracias!*

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>1</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2 Materiales magnéticos y modelo de Ising</b>	<b>5</b>
2.1 Magnetización e inducción magnética . . . . .	5
2.2 Susceptibilidad y permeabilidad. . . . .	6
2.3 Ciclos de histéresis . . . . .	7
2.4 Transiciones de fase . . . . .	8
2.5 Materiales magnéticos . . . . .	9
2.6 Tipos de materiales magnéticos . . . . .	10
2.6.1 Paramagnetismo . . . . .	10
2.6.2 Ferromagnetismo . . . . .	11
2.6.3 Antiferromagnetismo . . . . .	12
2.6.4 Ferrimagnetismo . . . . .	13
2.7 Interacciones magnéticas . . . . .	14
2.7.1 Intercambio directo . . . . .	14
2.8 Modelo de Ising . . . . .	16
2.9 Modelo de Ising bidimensional . . . . .	17
2.10 Método Monte Carlo . . . . .	18
<b>3 Resultados y análisis</b>	<b>19</b>
3.1 Hamiltoniano de interacción y diagrama de fase de estado base . . .	19
3.2 Variables termomagnéticas del modelo . . . . .	21
3.3 Efectos del campo magnético externo $h'$ . . . . .	23
<b>4 Conclusiones</b>	<b>29</b>
<b>A Solución analítica a los modelos de Ising 1D y 2D</b>	<b>30</b>
A.1 Modelo de Ising en una dimensión: solución exacta . . . . .	30
A.1.1 La cadena de Ising . . . . .	30
A.2 Modelo de Ising en dos dimensiones . . . . .	33
A.2.1 Solución de Onsager . . . . .	34
<b>B Descripción del método Monte Carlo</b>	<b>37</b>
B.1 Muestreo directo . . . . .	38
B.2 Muestreo de importancia . . . . .	38
B.3 Descripción del algoritmo para modelos de Ising mixtos . . . . .	39

B.3.1	Algoritmo tipo baño térmico . . . . .	40
B.3.2	Tiempo de correlación $\tau$ y la función de autocorrelación temporal $C_T(t)$ . . . . .	42
B.4	Condiciones de Borde Periódicas . . . . .	43
	<b>Referencias bibliográficas</b>	<b>44</b>

# Índice de figuras

2.1	Curvas esquemáticas de magnetización para ferri y ferromagnetos. . . . .	7
2.2	Ciclo de histéresis para un ferro o ferrimagneto: $B_S$ es la inducción de saturación, $B_r$ la inducción residual y $H_c$ es la coercitividad. . . . .	7
2.3	Esquema de la alineación de los momentos magnéticos en un material paramagnético: (a) muestra la disposición desordenada en ausencia de un campo externo y (b) muestra la respuesta cuando se aplica un campo de intensidad moderada. . . . .	10
2.4	Ferromagnetismo. Alineación de momentos magnéticos iónicos (espines de electrones) en una única red. . . . .	11
2.5	Dependencia con la temperatura de la magnetización de saturación $M_S$ . . . . .	11
2.6	Esquema de la compenetración de los iones magnéticos en una muestra antiferromagnética. . . . .	12
2.7	Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura para un material antiferromagnético. . . . .	12
2.8	Orientación energéticamente más favorable de las magnetizaciones de las subredes en un antiferromagneto sometido a un campo externo $H$ . . . . .	12
2.9	Esquema de la compenetración de los iones magnéticos en un material ferrimagnético. . . . .	13
2.10	Magnetización de las subredes de un ferrimagneto. $T_{comp}$ es la temperatura de compensación donde $M_{total} = 0$ . . . . .	13
2.11	Esquema representativo de un sistema ferrimagnético en una dimensión cuya red está formada por dos subredes intercaladas con momentos magnéticos de espines $S = 3/2$ y $\sigma = 5/2$ . . . . .	16
2.12	Esquema de un sistema ferrimagnético de red cuadrada formada por dos subredes intercaladas de espines $S = 3/2$ y $\sigma = 5/2$ . $J$ es la interacción de intercambio a primeros vecinos. . . . .	17
3.1	Diagrama de fase del estado fundamental del sistema Ising mixto de espín- $3/2$ y espín- $5/2$ para el modelo $J_{AB} - h'$ . . . . .	20
3.2	Dependencia de los valores absolutos de las magnetizaciones de las subredes $A$ y $B$ con el campo magnético externo $h'$ . Los números en las curvas representan los valores de $k_B T'$ . . . . .	22
3.3	Dependencia del valor absoluto de la magnetización total por espín con el campo magnético externo $h'$ . En el recuadro presentamos una ampliación de la región que muestra discontinuidades en la magnetización. Los números en las curvas insertadas representan los valores de $k_B T'$ . . . . .	22

3.4	Dependencia de la susceptibilidad magnética por espín con el campo magnético longitudinal, para diferentes valores de la temperatura. Para $k_B T' = 0.2, 0.5$ , los picos más pequeños cerca de $h' = 5$ indican la inversión de las magnetizaciones de la subred. La transición ocurre en $h' = 10$ . . . . .	24
3.5	Dependencia de la energía por espín con el campo magnético longitudinal externo $h'$ . . . . .	24
3.6	Dependencia de las magnetizaciones de las subredes $M_A$ y $M_B$ por espín con la temperatura. En (a) para $h' = 0$ , $k_B T'_c$ es la temperatura crítica donde el sistema experimenta una transición continua. En (b) y (c) para $h' > 0$ , $k_B T'_d$ indica la temperatura a la cual ocurre la inversión de los espines en la subred. En (d) para valores grandes de $h'$ los espines se invierten, por lo que el sistema pasa suavemente a un estado desordenado al variar $T'$ . . . . .	25
3.7	En (a), (b) y (c) la dependencia con la temperatura de las magnetizaciones de las subredes por espín, para $h' < 0$ . En (d) la magnetización total por espín vs $K_B T'$ . Los números indican los valores de $h'$ . $k_B T'_{d1}$ y $k_B T'_{d3}$ indican las temperaturas a las que ocurre la inversión de los espines. . . . .	26
3.8	dependencia de la susceptibilidad magnética por espín con la temperatura, para varios valores de $h'$ . . . . .	27
3.9	Dependencia de la temperatura de transición $k_B T'_c$ con el campo magnético longitudinal, estimada a partir de los picos de $\chi_T$ . . . . .	28
A.1	(a) Ejemplo de condiciones de límite libre para $N = 9$ espines. Los espines en cada extremo interactúan con solo un espín. En contraste, todos los otros espines interactúan con dos espines. (b) Ejemplo de condiciones de contorno toroidales. El $n$ -ésimo espín interactúa con el primer espín para que la cadena forme un anillo. Como resultado, todos los espines tienen el mismo número de vecinos y la cadena no tiene superficie . . . . .	31
A.2	Las cuatro configuraciones posibles de la cadena de Ising $N = 2$ . . .	31
A.3	Ejemplo de una pared de dominio en el modelo de Ising bidimensional. 34	
A.4	Ejemplo de una pared de dominio en el modelo de Ising bidimensional. 36	

# Resumen

Aplicamos técnicas de simulación Monte Carlo para estudiar el comportamiento magnético de un sistema de Ising mixto en una red cuadrada, donde los espines  $S = \pm 3/2, \pm 1/2$  se alternan con los espines  $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$  en dos subredes interpenetrantes  $A$  y  $B$ , respectivamente. El hamiltoniano del sistema contiene una interacción ferrimagnética a vecinos más cercanos y un campo magnético longitudinal. Calculamos la dependencia de la magnetización total, las magnetizaciones de las subredes, la energía y la susceptibilidad magnética, con el campo magnético a una temperatura fija y su dependencia con la temperatura para un campo magnético fijo. Descubrimos que bajo la influencia del campo magnético el sistema antes mencionado presenta un fenómeno interesante asociado con una inversión de las magnetizaciones de subredes a bajas temperaturas. Descubrimos que nuestro sistema no tiene temperaturas de compensación. Además, vemos que el campo magnético suaviza la transición entre la fase ordenada y la paramagnética. Finalmente presentamos un diagrama de fase con las temperaturas críticas en términos del campo magnético.

# Capítulo 1

## Introducción

Estrictamente hablando, todos los materiales en la naturaleza son de alguna forma “magnéticos”, pues un material magnético está constituido por momentos magnéticos elementales (originados por sus electrones), que se acoplan mediante la denominada interacción de intercambio, dando así lugar a un momento magnético neto, que por unidad de volumen se denomina magnetización. Ahora bien, todo material está compuesto por átomos y estos a su vez poseen electrones; de modo que, en principio todo material es afectado magnéticamente si se encuentra en presencia de un campo magnético externo, y la respuesta a este estímulo se determinará por la intensidad de dicho campo [1].

Por lo anterior, las sustancias en la naturaleza se pueden clasificar según sus propiedades magnéticas en: diamagnéticas, paramagnéticas, ferromagnéticas, antiferromagnéticas y ferrimagnéticas. Estas propiedades se evidenciarán de acuerdo a las capas electrónicas incompletas en los átomos y a la acción de un campo magnético externo que obligue a los átomos del sistema a orientarse en una u otra dirección, dejándolo en un estado de magnetización inducida. En este sentido, se tiene presencia de diamagnetismo cuando los espines de los electrones se encuentran ordenados antiparalelamente dando como resultado la anulación de los efectos magnéticos del sistema, a diferencia del paramagnetismo en donde los espines de los electrones no se encuentran apareados, generando momentos magnéticos netos no nulos [2–4]. En cambio, el ferromagnetismo se caracteriza por presentar ordenamiento magnético de todos los momentos magnéticos de un sistema, en la misma dirección y sentido, esto quiere decir que los espines de los electrones internos desapareados se alinean en la red cristalina [4]. Asimismo, los fenómenos del antiferro y ferrimagnetismo se caracterizan en que la interacción entre los momentos magnéticos tiende a alinear momentos adyacentes antiparalelos entre sí, con la diferencia de que en los antiferro los momentos magnéticos antiparalelos se anulan entre sí dando como consecuencia una magnetización nula, mientras que en los ferri se presenta acoplamiento antiferromagnético entre iones de átomos distintos con momentos magnéticos diferentes, lo cual hace que el sistema exhiba magnetización espontánea [4,5].

Gracias a la física del magnetismo molecular, los materiales magnéticos pueden considerarse hoy en día indispensables en la tecnología moderna. Son componentes de muchos dispositivos electromecánicos, electrónicos y espintrónicos. Los materiales

magnéticos también se utilizan como componentes en una amplia gama de equipos industriales y médicos. Los materiales de imanes permanentes son esenciales en los dispositivos para almacenar energía en un campo magnético estático. Las aplicaciones principales implican la conversión de energía mecánica en eléctrica y viceversa, o el ejercicio de una fuerza sobre objetos ferromagnéticos blandos. Las aplicaciones de los materiales magnéticos en la tecnología de la información están en continuo crecimiento [2]. La física del magnetismo molecular es también de gran importancia para crear nuevos materiales magnéticos basados en redes moleculares, entre los que se encuentran los sistemas ferromagnéticos y ferrimagnéticos [6].

Cabe destacar que las propiedades físicas de los materiales moleculares magnéticos que presentan los fenómenos del ferromagnetismo o ferrimagnetismo se pueden describir cualitativamente por medio de configuraciones de espines mixtos, como los modelos de Ising [7]. En estos sistemas, los espines de diferentes momentos magnéticos se alternan en redes bipartitas en las cuales se consideran diversas interacciones tales como, intercambio ferromagnético y/o antiferromagnético a primeros y segundos vecinos, anisotropías de ion simple y campos magnéticos externos fijos o variables en el tiempo [8–10]. La ventaja de estos modelos es que el Hamiltoniano se puede construir agregando diferentes interacciones, ayudando a comprender el papel de cada uno de ellos en el comportamiento magnético del sistema. Los resultados obtenidos son muy difíciles de verificar experimentalmente porque los sistemas reales son muy complejos, pero representan una herramienta útil para explorar una gran variedad de fenómenos como temperaturas de compensación, ciclos de histéresis, comportamiento reentrante, transiciones de fase, etc. [11–16].

Por otro lado, cada día se sintetizan nuevos materiales magnéticos que consisten en configuraciones de espines alternados, tales como nanocables magnéticos  $Co - Cu$  [17],  $Ga_{1-\chi}Cu_{\chi}N$  [18] y  $Fe_3O_4$  [19], nanocubos magnéticos [20],  $Fe$  [21] y  $Ni$  [22]. Los efectos de la cubierta superficial sobre las propiedades magnéticas de un nanocubo de Ising se han estudiado en [23]. Además, los modelos ferrimagnéticos de Ising se han utilizado para estudiar nanoislands [24]. Existe un gran interés en el estudio de estas nanoestructuras debido a sus propiedades físicas peculiares en comparación con las de los materiales en todo su volumen, y a sus numerosas aplicaciones en nuevas tecnologías, tales como dispositivos de almacenamiento magnético de ultra alta densidad [25], medios de grabación de ultra alta densidad [26] y aplicaciones biomédicas [27], entre otras. También se han estudiado modelos similares en los que interactúan diferentes subredes alternas en el contexto del modelado social dinámico [28]. A través de diferentes métodos y estructuras cristalinas, muchos trabajos teóricos han contribuido a la caracterización magnética de varios modelos de Ising mixtos, como los sistemas de espines  $(2 - 5/2)$  [29, 30],  $(3/2 - 5/2)$  [31–33],  $(1/2 - 5/2)$  [34],  $(2 - 3/2)$  [35],  $(1/2 - 1)$  [36–38],  $(1 - 3/2)$  [39] y  $(1 - 2)$  [40], por mencionar algunos. En el presente trabajo analizamos algunos fenómenos críticos en el modelo de Ising  $(3/2 - 5/2)$  en una red cuadrada, con interacción ferrimagnética a vecinos más cercanos (primeros vecinos), bajo el efecto de un campo magnético longitudinal externo,  $h$ .

Nuestro estudio se basa en una simulación Monte Carlo, dado que gran par-

te del trabajo en este campo se ha realizado con enfoques de campo medio, que han demostrado no ser confiables en varios casos [38]. La investigación experimental [41–43] y los estudios teóricos [12,34] indican que este tipo de campos magnéticos afecta significativamente el comportamiento magnético del sistema. La literatura nos enseña que se han analizado diversas propiedades magnéticas para los sistemas Ising sometidos a campos magnéticos longitudinales, tales como temperaturas de transición [8], comportamiento térmico de las magnetizaciones y susceptibilidades [44], comportamiento de histéresis [32], transiciones de fase de primer y segundo orden, puntos tricríticos y puntos de compensación [12,45]. De igual manera, se han estudiado comportamientos de energía libre y multicomensación [34,46]; así como también, magnetizaciones longitudinales y transversales totales [47], y susceptibilidades transversal y longitudinal [48]. No menos importantes son las investigaciones de Mohamad et al sobre la existencia de temperaturas de compensación y su dependencia del campo externo longitudinal [49] y las de Neto et al. sobre el comportamiento crítico de modelos antiferromagnéticos y antiferromagnéticos anisotrópicos de Ising bidimensionales, tanto en campos magnéticos longitudinales como transversales [50]. También son destacables los estudios de Aouzi et al. sobre las propiedades termodinámicas y magnéticas de un sistema Ising mixto en una matriz triangular en presencia de campos longitudinales [51] y los analizados bajo un campo longitudinal oscilante en el tiempo para calcular diagramas de fase dinámicos a temperatura reducida [52]. Otros fenómenos interesantes que se han calculado son temperaturas de compensación dinámicas en capas alternas de una red hexagonal [53] y puntos multicríticos y de temperatura cero con comportamiento reentrante [54], entre otros. En particular, el modelo mixto  $(3/2 - 5/2)$  estudiado en este trabajo es interesante para la comprensión de ciertos compuestos biológicos conocidos como ferricitocromos  $c'$  [55], que se utilizan como base sintética para diseñar nuevos biomateriales como materiales catalíticos nanoporosos [56].

El trabajo se encuentra estructurado de la siguiente forma: En el Capítulo 2 se estudia la teoría necesaria para la comprensión del tema en estudio. En el Capítulo 3 definimos el modelo (Hamiltoniano) junto con sus variables termomagnéticas, seguido del análisis de los distintos efectos del campo magnético longitudinal sobre las magnetizaciones, la energía y la susceptibilidad magnética. Finalmente damos el resumen y las conclusiones en el Capítulo 4.

# Capítulo 2

## Materiales magnéticos y modelo de Ising

En este capítulo compilamos una serie de fundamentos básicos que ayudan a comprender de mejor forma los diversos fenómenos caracterizados en este trabajo. Partimos de los conceptos más simples del magnetismo como son la magnetización y la inducción magnética, abordando luego susceptibilidad, histéresis magnética y transiciones de fase, fenómenos estos íntimamente ligados a las diversas clases de estructuras magnéticamente ordenadas, las cuales se detallan brevemente. Por último, Describimos el método de simulación Monte Carlo.

### 2.1. Magnetización e inducción magnética

Cuando se aplica un campo magnético,  $H$ , a un material, la respuesta del material se denomina inducción magnética,  $B$ . La relación entre  $B$  y  $H$  es una propiedad del material. En algunos materiales (y en el espacio libre),  $B$  es una función lineal de  $H$ , pero en general es mucho más complicada y, a veces, ni siquiera tiene un valor único. La ecuación que relaciona  $B$  y  $H$  es (en unidades cgs)

$$B = H + 4\pi M \quad (2.1)$$

donde  $M$  es la magnetización del medio. La magnetización se define como el momento magnético ( $m$ ) por unidad de volumen,

$$M = \frac{m}{V} \quad (2.2)$$

$M$  es una propiedad del material y depende de los momentos magnéticos individuales de los iones, átomos o moléculas, y de cómo estos momentos dipolares interactúan entre sí. La unidad cgs de magnetización es el emu/cm<sup>3</sup>. Dado que en el espacio libre  $B = H$  y  $M = 0$ , se podría esperar que la unidad de inducción magnética debería ser la misma que la del campo magnético, es decir, el oersted. Este no es el caso y de hecho, la unidad de inducción magnética se llama Gauss (G).

En unidades SI la relación entre  $B$ ,  $H$  y  $M$  es

$$B = \mu_0(H + M) \quad (2.3)$$

donde  $\mu_0$  es la permeabilidad del espacio libre. Las unidades de  $M$  son las mismas que las de  $H$  (A/m), y las de  $\mu_0$  son weber/(Am) también conocidas como Henry/m. Entonces las unidades de  $B$  son Weber/m<sup>2</sup>, o Tesla (T); 1 G=10<sup>-4</sup>T [3].

## 2.2. Susceptibilidad y permeabilidad.

Las propiedades de un material están definidas no solo por la magnetización o la inducción magnética, sino por la forma en que estas cantidades varían con el campo magnético aplicado.

La relación de  $M$  a  $H$  se llama susceptibilidad:

$$\chi = \frac{M}{H} \quad \left( \frac{\text{emu}}{\text{cm}^3 \text{Oe}} \right). \quad (2.4)$$

La susceptibilidad indica qué tan sensible es un material a un campo magnético aplicado. (A veces, el símbolo  $\kappa$  se utiliza para la susceptibilidad por unidad de volumen; entonces  $\chi = \kappa/\rho$  (emu/(g·Oe)) es la susceptibilidad por unidad de masa).

La relación de  $B$  a  $H$  se llama permeabilidad:

$$\mu = \frac{B}{H} \quad \left( \frac{\text{gauss}}{\text{Oe}} \right). \quad (2.5)$$

$\mu$  indica qué tan permeable es el material al campo magnético. Un material que concentra una gran cantidad de densidad de flujo en su interior tiene una alta permeabilidad. Usar la relación  $B = H + 4\pi M$  nos da la relación (en unidades cgs) entre permeabilidad y susceptibilidad:

$$\mu = 1 + 4\pi\chi. \quad (2.6)$$

Tengamos en cuenta que en unidades SI la susceptibilidad es adimensional y la permeabilidad está en unidades de Henry/m. La relación correspondiente entre permeabilidad y susceptibilidad en unidades SI es

$$\frac{\mu}{\mu_0} = 1 + \chi. \quad (2.7)$$

Las gráficas de  $M$  o  $B$  versus  $H$  se denominan curvas de magnetización y son características del tipo de material. La Fig. 2.1 muestra curvas de magnetización esquemáticas para ferrimagnetos y ferromagnetos. En el esquema se observa que se obtiene una magnetización mediante la aplicación de un campo externo. Por otro lado, la magnetización se satura: por encima de un cierto campo aplicado, un aumento de campo provoca un aumento pequeño de la magnetización. Tanto  $\chi$  como  $\mu$  son positivos y son funciones del campo aplicado. Finalmente, disminuir el campo a cero después de la saturación no reduce la magnetización a cero. Este fenómeno

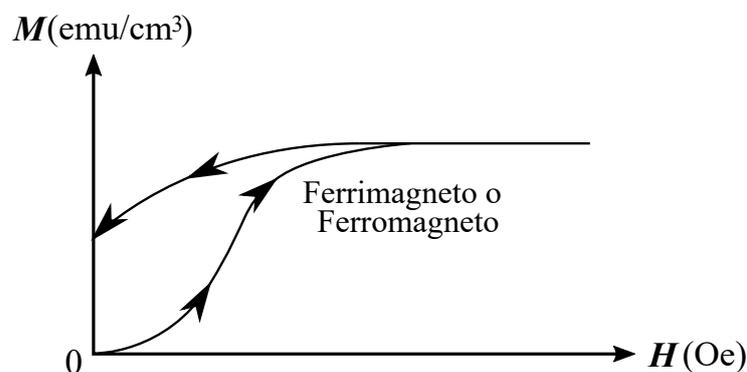


Figura 2.1: Curvas esquemáticas de magnetización para ferri y ferromagnetos.

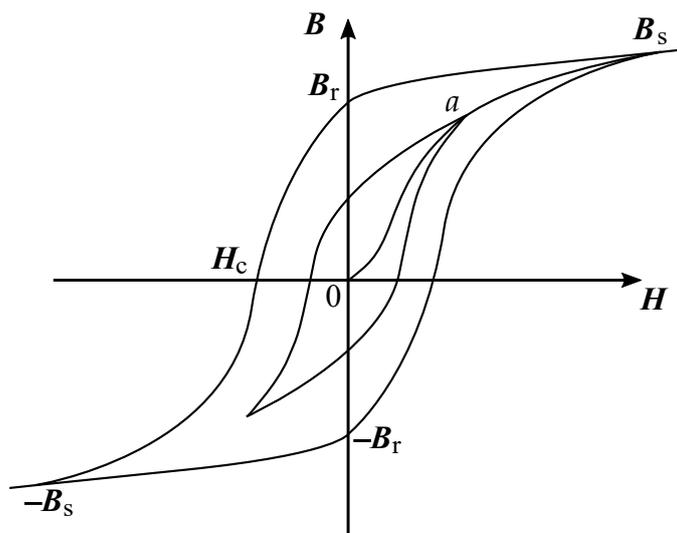


Figura 2.2: Ciclo de histéresis para un ferro o ferrimagneto:  $B_s$  es la inducción de saturación,  $B_r$  la inducción residual y  $H_c$  es la coercitividad.

se llama histéresis y es muy importante en aplicaciones tecnológicas. Por ejemplo, el hecho de que los materiales ferromagnéticos y ferrimagnéticos conserven su magnetización en ausencia de un campo permite que se conviertan en imanes permanentes [3].

### 2.3. Ciclos de histéresis

Acabamos de ver que reducir el campo a cero no reduce la magnetización de un ferromagneto a cero. De hecho, los ferromagnetos y ferrimagnetos continúan mostrando un comportamiento interesante cuando el campo se reduce a cero y luego se invierte en dirección. La gráfica de  $B$  (o  $M$ ) versus  $H$ , mostrada en la Fig. 2.2 se llama ciclo de histéresis.

El material magnético comienza en el origen en un estado no magnetizado, y la inducción magnética sigue la curva de 0 a  $B_s$  a medida que aumenta el campo en la dirección positiva. Aunque la magnetización es constante después de la saturación (como vimos en la Fig. 2.1),  $B$  continúa aumentando, porque  $B = H + 4\pi M$ . El valor

de  $B$  en  $B_s$  se llama inducción de saturación, y la curva de  $B$  desde el estado desmagnetizado a  $B_s$  se llama curva de inducción normal.

Cuando  $H$  se reduce a cero después de la saturación, la inducción disminuye de  $B_s$  a  $B_r$ , la inducción residual o remanencia. El campo inverso requerido para reducir la inducción a cero se llama coercitividad,  $H_c$ .

Cuando  $H$  invertido aumenta más, la saturación se logra en la dirección inversa. El ciclo que se traza se denomina ciclo de histéresis principal. Ambas puntas representan la saturación magnética y existe una simetría de inversión sobre el origen. Si se interrumpe la magnetización inicial (por ejemplo, en el punto  $a$ ), y  $H$  se invierte y luego se vuelve a aplicar, entonces la inducción sigue un ciclo de histéresis menor [3].

## 2.4. Transiciones de fase

Para la descripción de las propiedades macroscópicas de los sólidos, se usan cantidades tales como la masa, la energía total, el momento magnético, etc. Para materiales homogéneos es conveniente dividir estas cantidades por su volumen para obtener la densidad de masa, densidad de energía, magnetización, etc., a las que llamaremos 'variables mecánicas'. Ahora bien, existen otras cantidades tales como la presión aplicada, la temperatura, el campo externo, etc., que caracterizan el reservorio con el cual el material está en contacto. Estas cantidades son llamadas 'campos externos', y en muchos casos el valor de las variables mecánicas está unívocamente determinado si los valores de los campos externos son especificados.

Dado un conjunto de campos externos, las variables mecánicas adoptan ciertos valores que caracterizan el estado del sistema. Muchos de estos sistemas experimentan cambios cualitativos en su estado para ciertos valores de los campos externos (cambios finitos de las variables mecánicas para variaciones infinitesimales de los campos aplicados, cambios de simetría, etc.). Esto caracteriza una transición de fase [57].

En un sistema termodinámico, una transición de fase es la transformación que experimenta el sistema al cambiar de una fase a otra. La característica distintiva de una transición de fase es un cambio abrupto y repentino en una o más propiedades físicas (en particular la capacidad calorífica) con una pequeña variación en una variable termodinámica como la temperatura. Ejemplos de transiciones de fase son: transiciones entre fases sólida, líquida y gaseosa; transiciones en materiales magnéticos entre fases ferromagnéticas y paramagnéticas en la temperatura crítica.

Las transiciones se presentan cuando la energía libre del sistema no es analítica para algunas variables termodinámicas. Esta no-analiticidad principalmente se genera debido a las interacciones de un número extremadamente grande de partículas en un sistema, y no aparece en sistemas de tamaño finito. Una transición de fase magnética está definida por el comportamiento de la energía libre, el calor específico, la magnetización y la susceptibilidad en el punto crítico, el cual ocurre en la temperatura donde el parámetro de orden (que en el caso de sistemas magnéticos es la

magnetización  $M$ ) se desvanece.

Las transiciones de fase pueden ser de primer orden, de segundo orden o de orden superior, siendo las más comunes las primeras dos, a las cuales nos referimos a continuación.

- Las transiciones de primer orden también denominadas transiciones discontinuas son aquellas donde la derivada de primer orden de la energía libre exhibe una discontinuidad. dichas transiciones implican un calor latente. Durante este tipo de transición un sistema emite o absorbe cierta cantidad de energía. Como la energía no puede transmitirse instantáneamente entre el sistema y su ambiente, las transiciones de primer orden están asociadas con regímenes de fases mixtas en las cuales algunas partes del sistema han completado la transición y otras no. Estas transiciones discontinuas son difíciles de estudiar debido a su dinámica violenta, sin embargo muchas transiciones de fase importantes caen dentro de esta categoría.
- Las transiciones de segundo orden (también conocidas como transiciones de fase continuas). Aquí la energía libre y la primera derivada de la energía libre son continuas, mientras que la segunda derivada de la energía libre es discontinua. En este tipo de transiciones de fase, no hay calor latente asociado. Además, se caracterizan por una susceptibilidad divergente

Las cuestiones de interés en el estudio de transiciones de fase son: qué tipo de transición experimenta un sistema, qué causa la transición y cuáles son los exponentes críticos. Los exponentes críticos describen el comportamiento de ciertas cantidades físicas cerca del punto crítico [58].

## 2.5. Materiales magnéticos

Los materiales magnéticos juegan un papel destacado en la tecnología moderna. Son componentes clave de motores, generadores, transformadores y en el almacenamiento magnetoóptico de información. Tradicionalmente, solo aquellos materiales que exhiben propiedades ferromagnéticas, antiferromagnéticas o ferrimagnéticas se denominan "magnéticos" [59].

Dependiendo del valor de la coercitividad, los materiales ferromagnéticos se clasifican en duros o blandos. Un imán duro necesita un campo grande para reducir su inducción a cero (o por el contrario para saturar la magnetización). Un imán blando se satura fácilmente, pero también se desmagnetiza fácilmente. Los materiales magnéticos duros y blandos obviamente tienen aplicaciones totalmente complementarias. Finalmente, los materiales magnéticos semiduros (en su mayoría medios de almacenamiento) tienen coercitividades entre los dos valores anteriores. En aplicaciones modernas las propiedades magnéticas se adaptan mediante el ajuste de precisión de la microestructura del material. Por lo tanto, un problema central en el desarrollo y la aplicación de materiales magnéticos blandos y duros es la conexión entre las propiedades magnéticas extrínsecas (coercitividad, remanencia, ciclo de histéresis) y la microestructura.

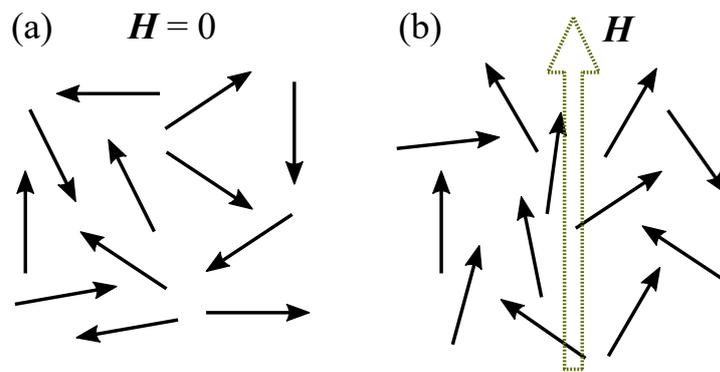


Figura 2.3: Esquema de la alineación de los momentos magnéticos en un material paramagnético: (a) muestra la disposición desordenada en ausencia de un campo externo y (b) muestra la respuesta cuando se aplica un campo de intensidad moderada.

## 2.6. Tipos de materiales magnéticos

Todas las sustancias muestran algún tipo de comportamiento magnético. Después de todo están formadas por partículas cargadas: electrones y protones. El espín de los electrones y su movimiento orbital alrededor del núcleo es el causante del magnetismo de los materiales. La forma en que las nubes de electrones se organizan en átomos y cómo se comportan los grupos de estos átomos es lo que determina las propiedades magnéticas del material. El átomo (o conjunto de átomos) en efecto se convierte en un dipolo magnético o en un mini imán de barra que puede alinearse de acuerdo con el campo magnético aplicado [60]. Entre todos los tipos de materiales existentes hay cuatro que destacan más que los demás, los cuales son los paramagnéticos, ferromagnéticos, ferrimagnéticos y los antiferromagnéticos [4].

### 2.6.1. Paramagnetismo

Se conoce como paramagnetismo a la tendencia de los momentos magnéticos libres (espín u orbitales) a alinearse paralelamente a un campo magnético. Sin un campo magnético externo estos momentos magnéticos se orientan aleatoriamente y, por lo tanto, se cancelan mutuamente. Como resultado, la magnetización neta es cero (Fig. 2.3(a)). Sin embargo, cuando se aplica un campo externo los vectores magnéticos individuales tienden a girar en la dirección del campo. La agitación térmica contrarresta la alineación, por lo que solo una pequeña fracción de ellos se desvía hacia la dirección del campo, tal como se ilustra en la Fig. 2.3(b). Por tanto, el paramagnetismo en órbita de electrones depende de la temperatura [61].

El paramagnetismo se encuentra, en general, en moléculas que poseen un número impar de electrones. También se encuentra en algunos compuestos como el oxígeno molecular y algunos hidrocarburos que, aunque poseen un número par de electrones, tienen dos de estos electrones sin aparear. De manera similar, el paramagnetismo se encuentra en átomos e iones de las diversas series de elementos de transición, siempre que estos contengan un nivel de energía de electrones  $d$  o  $f$  parcialmente lleno [62].

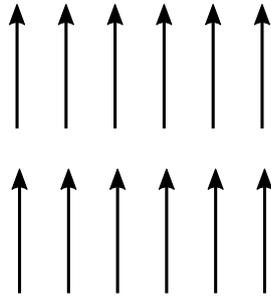


Figura 2.4: Ferromagnetismo. Alineación de momentos magnéticos iónicos (espines de electrones) en una única red.

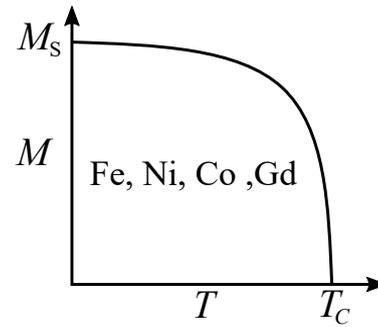


Figura 2.5: Dependencia con la temperatura de la magnetización de saturación  $M_S$ .

## 2.6.2. Ferromagnetismo

El ferromagnetismo es un fenómeno físico que presenta ordenamiento magnético de todos los momentos magnéticos de un sistema, en la misma dirección y sentido, esto quiere decir que los espines de los electrones internos desapareados se alinean en la red cristalina. Entre los elementos ferromagnéticos se destacan el hierro (Fe), el cobalto (Co), el níquel (Ni) y el Gadolinio (Gd) [2]. Los ferromagnetos presentan características bastante interesantes, destacándose las siguientes:

1. Por debajo de la temperatura de Curie,  $T_c$  (la cual lleva el nombre del físico francés **Pierre Curie** (1859-1906), quien la descubrió en 1895), poseen una magnetización espontánea  $M_S(T)$ , es decir, una magnetización en ausencia de un campo aplicado. Este es el resultado de una interacción de intercambio mecánico-cuántica para la cual la energía magnética es menor si los momentos magnéticos iónicos son paralelos y cooperativamente alineados (Fig. 2.4).
2. La magnitud de la magnetización espontánea  $M_S(T)$  es función de la temperatura; es máxima en 0K, decrece a medida que la temperatura incrementa y es cero en la temperatura de Curie  $T_c$  (Fig. 2.5).
3. Si se calienta por encima de la temperatura de Curie, la magnetización espontánea desaparece y el material se vuelve paramagnético.
4. Al enfriarse por debajo de  $T_c$ , la magnetización espontánea reaparece con igual intensidad, asumiendo, por supuesto, que no ha habido cambios estructurales o químicos durante el calentamiento.
5. Los materiales ferromagnéticos, aunque magnetizados espontáneamente, pueden no mostrar magnetización observable macroscópicamente, en aparente contradicción con la propiedad 1; un ejemplo es una pieza ordinaria de hierro o acero debajo de  $T_c$ .
6. Cuando los ferromagnetos se encuentran en el estado descrito por la propiedad 5, la magnetización observable a menudo se puede aumentar de cero a la saturación mediante la aplicación de un campo tan bajo como  $10\text{Am}^{-1}$ . Sin

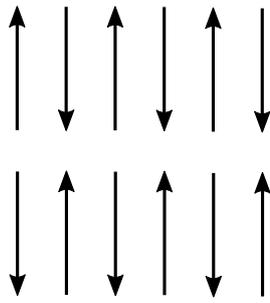


Figura 2.6: Esquema de la compenetración de los iones magnéticos en una muestra antiferromagnética.

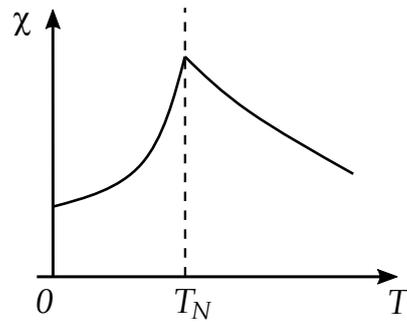


Figura 2.7: Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura para un material antiferromagnético.

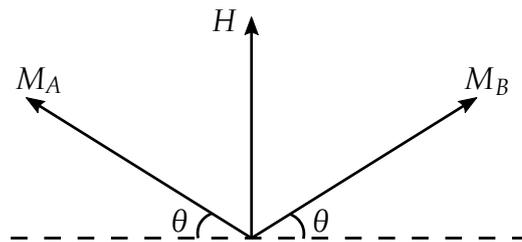


Figura 2.8: Orientación energéticamente más favorable de las magnetizaciones de las subredes en un antiferromagneto sometido a un campo externo  $H$ .

embargo, el campo requerido depende del material y, aunque es muy bajo para materiales blandos de alta permeabilidad, generalmente es muy alto para materiales magnéticos duros, es decir, imanes permanentes [63].

### 2.6.3. Antiferromagnetismo

En los materiales antiferromagnéticos la interacción entre los momentos magnéticos tiende a alinear momentos adyacentes antiparalelos entre sí. Podemos pensar que los antiferromagnetos contienen dos subredes de iones magnéticos idénticos e interpenetrantes, como se ilustra en la Fig. 2.6. Aunque un conjunto de iones magnéticos se magnetiza espontáneamente por debajo de cierta temperatura crítica (llamada temperatura Néel,  $T_N$ , en honor a **Louis E. Néel** (1904-2000), quien fue el primero en identificar el fenómeno en 1948), el segundo conjunto se magnetiza espontáneamente en la misma cantidad en la dirección opuesta. Como resultado, los antiferromagnetos no tienen magnetización espontánea neta y su respuesta a los campos externos a una temperatura fija es similar a la de los materiales paramagnéticos: la magnetización es lineal en el campo aplicado y la susceptibilidad es pequeña y positiva. La dependencia de la temperatura de la susceptibilidad por encima de la temperatura Néel también es similar a la de un paramagneto, pero por debajo de  $T_N$  disminuye al disminuir la temperatura, como se muestra en la Fig. 2.7 [3]. Asimismo, en presencia del campo magnético externo, el ordenamiento energéticamente más favorable en un antiferromagneto se presenta cuando las magnetizaciones de las subredes están simétricamente inclinadas formando un ángulo  $\theta$  con la dirección perpendicular al campo, como se exhibe en la Fig. 2.8 [64].

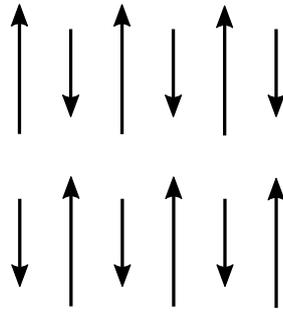


Figura 2.9: Esquema de la compenetración de los iones magnéticos en un material ferrimagnético.

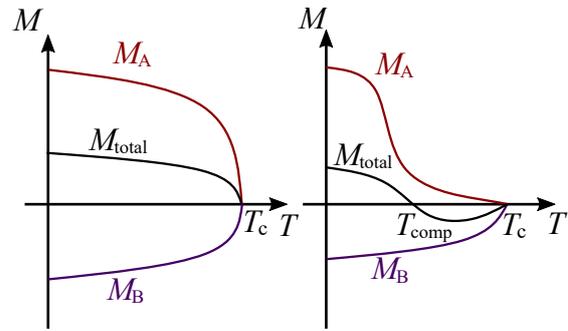


Figura 2.10: Magnetización de las subredes de un ferrimagneto.  $T_{comp}$  es la temperatura de compensación donde  $M_{total} = 0$ .

## 2.6.4. Ferrimagnetismo

El ferrimagnetismo representa una posición intermedia entre ferro y antiferromagnetismo. La caracterización más simple, pero ya satisfactoria para la comprensión fundamental, viene dada por la suposición de dos subredes magnéticas con orientación antiparalela pero diferente magnitud de cada magnetización (Fig. 2.9). Así, la magnetización total no desaparece como en el caso antiferromagnético [4]. Los materiales ferrimagnéticos experimentan una magnetización espontánea en un rango de temperatura  $T < T_c$ , aún en ausencia de un campo magnético externo.  $T_c$  es alguna temperatura crítica donde el sistema hace una transición a la fase paramagnética.

A diferencia de los ferromagnetos que generalmente son metálicos, muchos ferrimagnetos son sólidos iónicos, lo que conlleva a que estén eléctricamente aislados [3], es decir, poseen baja conductividad eléctrica, alta permeabilidad magnética y gran magnetización de saturación, entre otras propiedades. Tales características son ventajosas en aplicaciones tecno-industriales donde se requieran aislantes magnéticos. Por ejemplo, cuando se requiere un material con magnetización espontánea para operar a altas frecuencias, se usan sustancias ferrimagnéticas con este propósito porque el voltaje inducido no genera corrientes significativas en el material aislante. Como ejemplos de materiales ferrimagnéticos están los óxidos dobles de metales cuya composición es  $M \cdot OFe_2 O_3$ , siendo  $M$  un metal divalente de la forma  $Mg^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$  o  $Mn^{2+}$ . A este tipo de óxidos se les conoce como ferritas, los cuales se consideran los sistemas ferrimagnéticos más típicos. Cabe destacar que en los ferrimagnetos los campos moleculares en cada subred son diferentes, lo que permite que  $M_A$  y  $M_B$  tengan diferentes dependencias con la temperatura. Esta situación se refleja en un proceso complejo en la dependencia de la magnetización total del sistema con la temperatura, dado que una subred puede dominar la magnetización cuando  $T \rightarrow 0$ , mientras que la otra subred dominaría para  $T \rightarrow T_c$ . Este tipo de comportamiento en los ferrimagnetos hace que el material experimente un suceso magnético conocido como fenómeno de compensación, en el cual la magnetización total se anula para cierta temperatura,  $T_{comp}$  (conocida como temperatura de compensación) y posteriormente cambia de signo en  $T > T_{comp}$  (Fig. 2.10) [64].

## 2.7. Interacciones magnéticas

La situación en la que los electrones de los átomos magnéticos vecinos interactúan directamente se llama “intercambio directo” porque la interacción está mediada sin necesidad de átomos intermedios. Si la superposición de las funciones de onda involucradas es pequeña, entonces el intercambio directo no es el mecanismo dominante para las propiedades magnéticas. Para esta clase de sistemas, la interacción de intercambio indirecto es responsable del magnetismo.

### 2.7.1. Intercambio directo

Supongamos un modelo con solo dos electrones que exhiben los vectores de posición  $\mathbf{r}_1$  y  $\mathbf{r}_2$ . Además, consideramos que la función de onda total está compuesta por el producto de estados  $\psi_a$  y  $\psi_b$ . Los electrones involucrados son indistinguibles. Por lo tanto, la función de onda al cuadrado debe ser invariable para el intercambio de ambos electrones. Debido a que los electrones son fermiones, se debe cumplir el principio de exclusión de Pauli [65], lo que conduce a una función de onda antisimétrica. Teniendo en cuenta el espín de los electrones, se ofrecen dos posibilidades: una parte espacial simétrica  $\psi$  en combinación con una parte de espín antisimétrica  $\chi$  o una parte espacial antisimétrica en combinación con una parte de espín simétrica. La primera situación representa un estado singlete ( $\psi_s$ ) con  $s_{\text{total}} = 0$ , la segunda un estado triplete ( $\psi_T$ ) con  $s_{\text{total}} = 1$ , siendo  $s_{\text{total}}$  el momento angular de espín total. Las funciones de onda total correspondientes están dadas por:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)] \quad (2.8)$$

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)] \quad (2.9)$$

Las energías de los estados singlete y triplete se determinan por:

$$E_s = \int \psi_s^* H \psi_s dV_1 dV_2 \quad (2.10)$$

$$E_T = \int \psi_T^* H \psi_T dV_1 dV_2 \quad (2.11)$$

Teniendo en cuenta las partes de espín normalizadas de las funciones de onda singlete y triplete, es decir

$$s^2 = (s_1 + s_2)^2 = s_1^2 + s_2^2 + 2s_1 \cdot s_2 \quad (2.12)$$

y teniendo en cuenta que  $s_{\text{total}} = s_1 + s_2$  (la suma de los momentos angulares de espín individuales de los dos electrones), el término  $s_1 \cdot s_2$  puede ser reescrito como

$$s_1 \cdot s_2 = \frac{1}{2} s_{\text{total}}(s_{\text{total}} + 1) - \frac{1}{2} s_1(s_1 + 1) - \frac{1}{2} s_2(s_2 + 1) \quad (2.13)$$

$$= \frac{1}{2} s_{\text{total}}(s_{\text{total}} + 1) - \frac{3}{4}, \quad (s_1 = s_2 = \frac{1}{2}) \quad (2.14)$$

$$s_1 \cdot s_2 = \begin{cases} -\frac{3}{4}, & \text{cuando } s_{\text{total}} = 0 \text{ (singlete)} \\ +\frac{1}{4}, & \text{cuando } s_{\text{total}} = 1 \text{ (triplete)} \end{cases} \quad (2.15)$$

El Hamiltoniano efectivo se puede expresar como:

$$H = \frac{1}{4}(E_s + 3E_T) - (E_s - E_T)s_1 \cdot s_2 \quad (2.16)$$

El primer término es constante y a menudo se incluye en otras contribuciones de energía. El segundo término depende del espín y es importante sobre las propiedades ferromagnéticas.

Definamos la constante de intercambio  $J$  por:

$$J = \frac{E_s - E_T}{2} \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1)\psi_b^*(\mathbf{r}_2)H\psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)dV_1dV_2 \quad (2.17)$$

Entonces, el término dependiente del espín en el Hamiltoniano efectivo se puede escribir como:

$$H_{\text{spin}} = -2Js_1 \cdot s_2 \quad (2.18)$$

Si la integral de intercambio  $J$  es positiva, entonces  $E_s > E_T$ , es decir, el estado triplete con  $s_{\text{total}} = 1$  se ve favorecido energéticamente. Si la integral de intercambio  $J$  es negativa, entonces  $E_s < E_T$ , es decir, se favorece energéticamente el estado singlete con  $s_{\text{total}} = 0$ .

Vemos que esta situación considerando solo dos electrones es relativamente simple. Pero, los átomos en los sistemas magnéticos exhiben muchos electrones. La ecuación de Schrödinger de estos sistemas de muchos cuerpos no se puede resolver sin suposiciones. La parte más importante de dicha interacción, como la interacción de intercambio, se aplica principalmente entre átomos vecinos. Esta consideración lleva dentro del modelo de Heisenberg a un término en el Hamiltoniano de:

$$H_{\text{spin}} = -\sum_{ij} J_{ij}s_i \cdot s_j \quad (2.19)$$

siendo  $J_{ij}$  la constante de intercambio entre espín  $i$  y espín  $j$ . El factor 2 se incluye en el conteo doble dentro de la suma. A menudo, una buena aproximación viene dada por:

$$J_{ij} = \begin{cases} J & \text{para espines de vecinos más cercanos} \\ 0 & \text{cualquier otro caso} \end{cases} \quad (2.20)$$

En general,  $J$  es positivo para los electrones en el mismo átomo, mientras que a menudo es negativo si ambos electrones pertenecen a átomos diferentes [4].

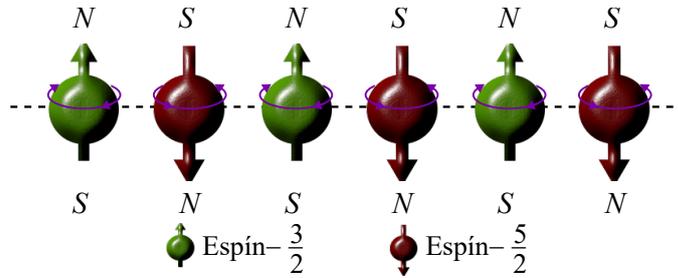


Figura 2.11: Esquema representativo de un sistema ferrimagnético en una dimensión cuya red está formada por dos subredes intercaladas con momentos magnéticos de espines  $S = 3/2$  y  $\sigma = 5/2$ .

## 2.8. Modelo de Ising

El modelo de Ising es uno de los pocos modelos de partículas interactuantes para el cual se conoce su solución exacta y sin duda el más sencillo de todos ellos. Este modelo es de gran interés por diversas razones. Por un lado, resulta interesante su papel en el desarrollo histórico de la comprensión de las transiciones de fase, en cuyo proceso representó un papel fundamental. En segundo lugar, el método de solución en una dimensión presentado por **Ernst Ising** (1900 – 1998) y luego extendido a dos dimensiones por **Lars Onsager** (1903 – 1976) (véase [Apéndice A](#)), constituye la base de diversos métodos modernos de cálculo en la física estadística de los fenómenos críticos. Cabe destacar que el modelo de Ising bidimensional es el más simple de una transición de fase, pero a pesar de esto no ha sido posible hasta ahora resolverlo exactamente en 1D y 2D en presencia de un campo magnético externo, por ello se acude a métodos aproximados y simulaciones computacionales. Aunque la comprensión del comportamiento termomagnético de las estructuras magnéticas reales es muy compleja, una gran ayuda para su caracterización cualitativa es el uso de configuraciones de espines mixtos. Este modelo se basa en la interacción entre dipolos magnéticos o espines fijos orientados paralelamente (caso ferromagnético) y explica satisfactoriamente la transición de fase que ocurre en el material real en la temperatura crítica  $T_c$ , desde la fase ferromagnética a la fase paramagnética [64].

El sistema considerado es un arreglo de  $N$  sitios que forman una red  $n$ -dimensional ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). En una dimensión tenemos simplemente una cadena de puntos en una línea como se aprecia en la [Fig. 2.11](#). A cada sitio se le asocia una variable de espín  $s_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Ésta puede tomar los valores  $+1$  o  $-1$  de acuerdo con las dos posibles orientaciones (a menos que se indique lo contrario), que usualmente se las denomina ‘up’ y ‘down’ respectivamente [66, 67]. La interacción es solo entre vecinos más cercanos y, como se vio anteriormente, está dada por  $J$  si los espines son paralelos y  $-J$  si los espines son antiparalelos. En presencia de un campo magnético  $h$ , la energía total se puede expresar en la forma

$$H = -J \sum_{i,j \langle nm \rangle}^N s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i \quad (2.21)$$

La primera suma en la [Ec. \(2.21\)](#) está sobre todos los pares de espines que son ve-

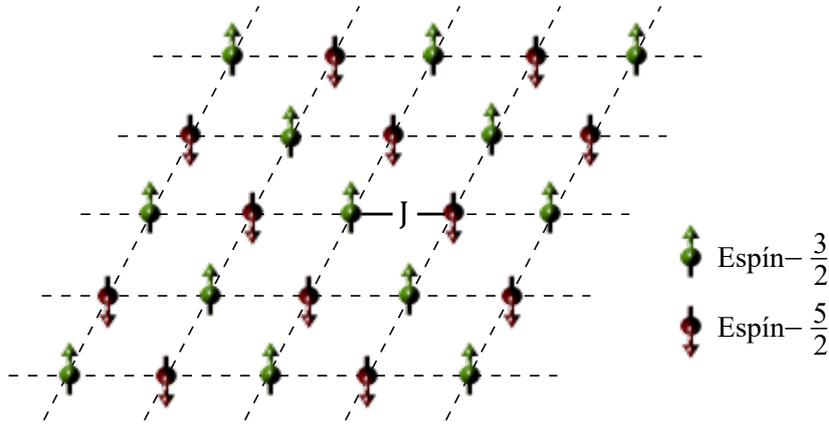


Figura 2.12: Esquema de un sistema ferrimagnético de red cuadrada formada por dos subredes intercaladas de espines  $S = 3/2$  y  $\sigma = 5/2$ .  $J$  es la interacción de intercambio a primeros vecinos.

cinos más cercanos. La interacción entre los dos espines vecinos más cercanos se cuenta solo una vez. En este caso los espines tienden a alinearse en la misma dirección del campo magnético  $h$  y toman el valor  $+1$  cuando  $h > 0$  y  $-1$  cuando  $h < 0$ . La magnetización se convierte en el espín neto (el número de espines positivos menos el número de espines negativos) en lugar del momento magnético neto [68].

## 2.9. Modelo de Ising bidimensional

En este modelo los espines están dispuestos en una red bidimensional (con  $n$  filas y  $n$  columnas), como muestra la Fig. Fig. 2.12. Por lo que los espines asociados a cada sitio de dicha red están identificados con dos subíndices:  $s_{ij}$ . Hay un total de  $N = n \times n$  sitios en la red, por lo tanto, el modelo tiene  $2^N$  posibles configuraciones [69]. Denotamos por  $s_j$  la configuración de la columna  $j$ , es decir

$$s_j = (s_{1,j}, s_{2,j}, \dots, s_{m,j}), \quad \text{donde } s_{i,j} = \pm 1. \quad (2.22)$$

El Hamiltoniano para este modelo de red cuadrada, en presencia de un campo magnético externo, está dado entonces por [67, 68]:

$$H = -J \left( \sum_i \sum_j s_{i,j} s_{i+1,j} + \sum_i \sum_j s_{i,j} s_{i,j+1} \right) - h \sum_i \sum_j s_{i,j} \quad (2.23)$$

Donde, claramente  $J$  es la constante de interacción entre dos espines,  $h$  es el campo magnético externo, que se supone en la misma dirección de los espines, y el último término representa lo que se conoce como energía Zeeman del sistema [70]. Cabe resaltar que todos los parámetros están en unidades de energía.

## 2.10. Método Monte Carlo

En mecánica estadística se considera que un problema está resuelto cuando se ha evaluado su función de partición exacta,  $Z$ , ya que esta contiene toda la información referente al sistema, incluyendo la presencia de transiciones de fase. El objetivo es, por lo tanto, evaluar la función de partición ya que entonces pueden calcularse los valores esperados de las cantidades observables del sistema. Sin embargo, en la teoría es extremadamente difícil evaluar la función de partición correspondiente a sistemas de muchas partículas en donde las interacciones entre ellas son apreciables. Cuando no es posible evaluar la función de partición en forma analítica, es necesario utilizar métodos numéricos entre los que el Monte Carlo es uno de los más usados [70].

El método Monte Carlo es un método no determinista o estadístico que se utiliza para aproximar expresiones matemáticas complejas y costosas de evaluar con exactitud. En una simulación Monte Carlo se intenta seguir la ‘dependencia del tiempo’ de un modelo para el cual el cambio o crecimiento no procede de una manera rigurosamente predefinida, sino mas bien de forma aleatoria que depende de una secuencia de números aleatorios que se genera durante la simulación.

La clave de este método está en entender el término ‘simulación’. Realizar una simulación consiste en repetir o duplicar las características y comportamientos de un sistema real. Así pues, el objetivo principal de la simulación Monte Carlo es intentar imitar el comportamiento de variables reales para, en la medida de lo posible, analizar o predecir cómo van a evolucionar [68]. En general, el método Monte Carlo permite evaluar numéricamente cierto tipo de integrales mediante una discretización aleatoria del espacio en cuestión. En mecánica estadística el método Monte Carlo se emplea para estudiar modelos de sistemas termodinámicos por medio de una simulación estocástica en una computadora. La descripción del sistema que se desea estudiar se hace en términos de un modelo y el Hamiltoniano asociado a este.

La forma en que el modelo de Ising es tratado por este método se basa en la idea de muestrear las regiones del espacio de integración donde se encuentran los estados importantes del sistema. De acuerdo con el método, los puntos adecuados para la evaluación de una integral se eligen conforme a una probabilidad  $P(x_\nu)$ ,  $\nu = 1, 2, \dots, n$ , de tal manera que sea más probable considerar puntos en donde la función tenga valores más significativos que en otras regiones, lo cual sirve para obtener los valores esperados de los observables físicos en estudio [70].

En el [Apéndice B](#) presentamos una descripción más detallada del método Monte Carlo.

# Capítulo 3

## Resultados y análisis

En este capítulo presentamos un detallado análisis del comportamiento termomagnético del modelo ferrimagnético de espines ( $S = 3/2$  y  $\sigma = 5/2$ ), considerando interacciones a primeros vecinos y con un campo longitudinal externo. Comenzando por el análisis de los diagramas de fase de los estado base, seguido de los efectos del campo magnético externo  $h$  sobre dicho sistema. Se ha demostrado que los diagramas de fase de estados base son una herramienta importante para la comprensión de los diagramas de fase a temperatura finita, para localizar regiones en donde el modelo podría presentar un interesante comportamiento magnético y para chequear la confiabilidad de los resultados numéricos y teóricos [33,46,71,72].

### 3.1. Hamiltoniano de interacción y diagrama de fase de estado base

Consideramos el sistema ferrimagnético tipo Ising mixto de espín-3/2 y espín-5/2 bajo los efectos de campo magnético longitudinal externo, para el caso con interacciones a primeros vecinos. Los espines se encuentran en sitios alternos de una red cuadrada de tamaño  $L \times L$  con  $L = 80$ . El sistema es descrito por el Hamiltoniano

$$H = -J_{AB} \sum_{\langle mn \rangle} S_i^A \sigma_j^B - h \left[ \sum_{i \in A} S_i^A + \sum_{j \in B} \sigma_j^B \right] \quad (3.1)$$

Donde  $S = \pm 3/2, \pm 1/2$  y  $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$  son los espines en los sitios de las subredes interpenetrantes  $A$  y  $B$ , respectivamente.  $J_{AB}$  es el parámetro de intercambio de vecinos más cercanos y  $h$  es un campo magnético longitudinal. La primera suma se realiza sobre todos los pares de espines de vecinos más cercanos, es decir, entre los espines  $S$  y  $\sigma$ . Las sumas sobre  $i$  y  $j$  se realizan en todos los sitios de las subredes  $A$  y  $B$ , respectivamente. Consideramos un acoplamiento antiferrimagnético entre vecinos más cercanos ( $J_{AB} < 0$ ) y tomamos condiciones de contorno periódicas. Cabe mencionar que todos los parámetros del Hamiltoniano están en unidades de energía. Para trabajar de forma más cómoda utilizaremos la notación  $h' = h/|J_{AB}|$  y  $k_B T' = k_B T/|J_{AB}|$ , de manera que  $h'$  y  $k_B T'$  son adimensionales, siendo  $k_B$  la constante de Boltzmann.

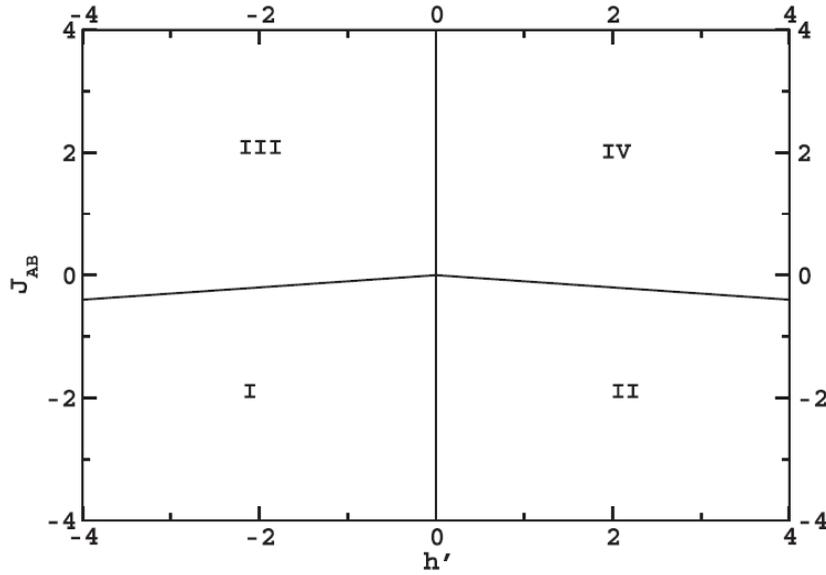


Figura 3.1: Diagrama de fase del estado fundamental del sistema Ising mixto de espín  $-3/2$  y espín  $-5/2$  para el modelo  $J_{AB} - h'$ .

Tabla 3.1: Energía de los estados fundamentales del modelo  $J_{AB} - h$

$s_1^A$ $\sigma_2^B$	$\sigma_1^B$ $s_2^A$	Energía	Región
$3/2$ $-5/2$	$-5/2$ $3/2$	$30J_{AB} + 2h$	I
$-3/2$ $5/2$	$5/2$ $-3/2$	$30J_{AB} - 2h$	II
$-3/2$ $-5/2$	$-5/2$ $-3/2$	$-30J_{AB} + 8h$	III
$3/2$ $5/2$	$5/2$ $3/2$	$-30J_{AB} - 8h$	IV

La simulación del modelo se realiza mediante un método Monte Carlo a través de un algoritmo baño térmico. Los datos se obtienen con  $M = 5 \times 10^4$  pasos Monte Carlo por sitio (MCSS), 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  $M_b = M/b$  medidas. Por tanto, los errores pueden calcularse como la desviación estándar de las medias de los bloques (véase [Apendice B](#)). Para este trabajo utilizamos  $b = 10$ .

Calculamos el diagrama del estado fundamental del modelo enumerando todos los estados posibles del sistema en una celda de  $2 \times 2$  unidades y calculamos su energía. Para el sistema  $(3/2 - 5/2)$  hay  $6^2 \times 4^2 = 576$  configuraciones de la celda unitaria. Muchas de estas configuraciones están degeneradas. Las ecuaciones de los límites entre las regiones del diagrama de fase se obtienen igualando por pares las energías del estado fundamental. Los diagramas de estado fundamental son útiles para comprender el comportamiento a baja temperatura de los sistemas. En la [Fig. 3.1](#)

Tabla 3.2: Líneas de coexistencia del modelo  $J_{AB} - h$

Fases	Línea de coexistencia	Rango de $h$	Rango de $J_{AB}$
I–II	$h = 0$	$h = 0$	$J_{AB} \leq 0$
II–IV	$J_{AB} = -(1/10)h$	$h \geq 0$	$J_{AB} \leq 0$
I–III	$J_{AB} = (1/10)h$	$h \leq 0$	$J_{AB} \leq 0$
III–IV	$h = 0$	$h = 0$	$J_{AB} \geq 0$

mostramos el diagrama de estado fundamental para este modelo, tiene cuatro regiones diferentes, dos ferrimagnéticas y dos ferromagnéticas. Las configuraciones de espín en cada región se muestran en la [Tabla 3.1](#), mientras que las ecuaciones de las líneas de coexistencia están en la [Tabla 3.2](#). Se puede observar que este modelo presenta simetría especular alrededor de la línea  $h' = 0$ .

## 3.2. Variables termomagnéticas del modelo

Para el estudio y análisis de las propiedades magnéticas de nuestro sistema calculamos numéricamente en función de la temperatura, las magnetizaciones por sitio,  $M_A$  y  $M_B$ , de las subredes de espines  $S$  y  $\sigma$  respectivamente, la magnetización total por sitio,  $M_T$ , la susceptibilidad magnética por sitio,  $\chi_T$ , y por último, calculamos la energía,  $E$ . Dichas cantidades describen termodinámicamente el sistema. Estas variables físicas están definidas por las siguientes relaciones:

$$M_A = \frac{2}{L^2} \langle \sum_i S_i^A \rangle \quad (3.2)$$

$$M_B = \frac{2}{L^2} \langle \sum_j \sigma_j^B \rangle \quad (3.3)$$

$$M_T = \frac{1}{2} (M_A + M_B) \quad (3.4)$$

Definiendo  $\beta = 1/k_B T$ , calculamos la susceptibilidad magnética total por sitio ( $\chi_T$ ), mediante la expresión

$$\chi_T = \frac{\beta}{L^2} \left( \langle M_T^2 \rangle - \langle M_T \rangle^2 \right). \quad (3.5)$$

La energía interna está dada por

$$E = \langle H \rangle \quad (3.6)$$

Todos los promedios  $\langle \dots \rangle$  están calculados a temperatura  $T$ .

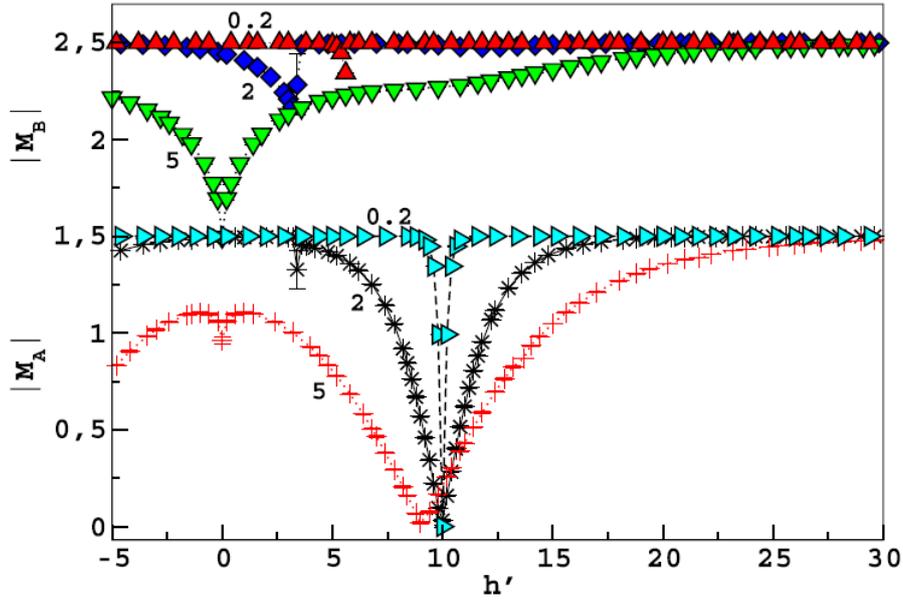


Figura 3.2: Dependencia de los valores absolutos de las magnetizaciones de las subredes  $A$  y  $B$  con el campo magnético externo  $h'$ . Los números en las curvas representan los valores de  $k_B T'$ .

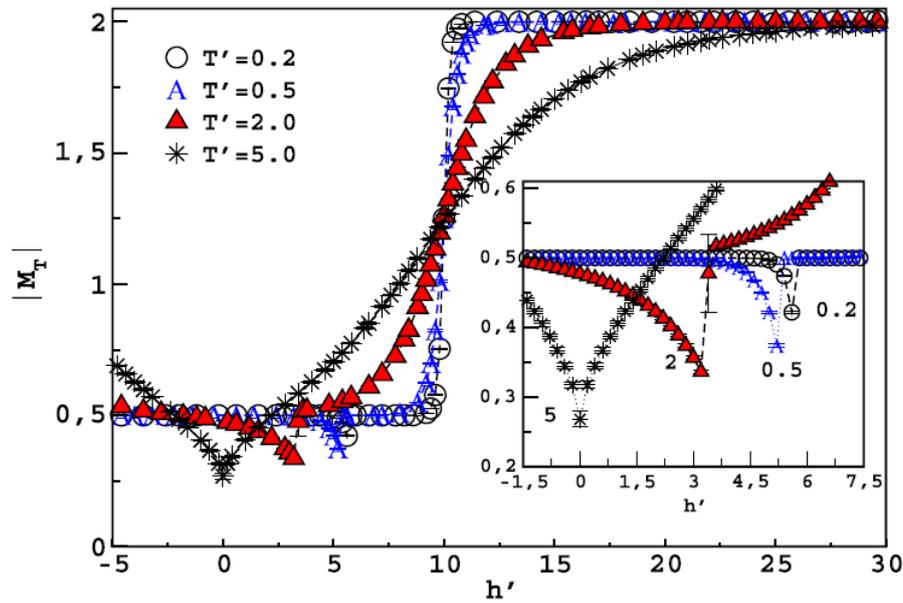


Figura 3.3: Dependencia del valor absoluto de la magnetización total por espín con el campo magnético externo  $h'$ . En el recuadro presentamos una ampliación de la región que muestra discontinuidades en la magnetización. Los números en las curvas insertadas representan los valores de  $k_B T'$ .

### 3.3. Efectos del campo magnético externo $h'$

A continuación analizamos las variaciones de la magnetización, susceptibilidad y energía cuando  $h'$  varía, para varios valores de temperatura. La Fig. 3.2 muestra la dependencia de los valores absolutos de las magnetizaciones de las subredes,  $|M_A|$  y  $|M_B|$  con  $h'$ , para valores fijos  $k_B T' = 0.2, 2, 5$ .  $|M_A|$  alcanza el valor cero en  $h' = 10$ , y luego aumenta a medida que  $h'$  se aleja de este valor hasta que alcanza un valor constante para valores suficientemente altos de  $|h'| > 10$ . La caída en  $h' = 10$  es muy abrupta a bajas temperaturas, indicando una transición de fase. Observe que  $h' = 10$  corresponde a la línea de coexistencia (para  $J_{AB} = -1$ ) entre las regiones II y IV del diagrama de fases dado en la Fig. 3.1, lo que significa que los espines  $S$  tienen la misma probabilidad de ser  $3/2$  que  $-3/2$ , es por eso que en  $T = 0$ ,  $M_A = 0$ , aumentar o disminuir el campo alrededor de  $h' = 10$  hará que los espines  $S$  sean predominantemente positivos o negativos, respectivamente. Este efecto también ocurre a temperaturas mayores a cero como se ve en la Fig. 3.2, pero de manera menos abrupta. El cambio de los espines  $S$  en  $h' = 10$  a temperaturas suficientemente bajas, parece conducir el sistema a una transición como se puede ver en la Fig. 3.3 y la Fig. 3.4. Para valores grandes de  $|h'|$ ,  $|M_A|$  toma el valor de 1.5 (lo que significa que los espines toman el valor de  $3/2$ ). Del mismo modo, a una temperatura constante,  $|M_B|$  cae hacia un valor mínimo a un cierto valor de  $h'$ , y luego aumenta cuando  $h'$  se aleja de él, hasta que alcanza un valor constante. La diferencia es que ahora el valor mínimo de  $|M_B|$  y el valor de  $h'$  en el que ocurre dependen de la temperatura. A medida que la temperatura aumenta, el valor mínimo de  $|M_B|$  disminuye y se produce a valores más bajos de  $h'$ . Para valores grandes de  $|h'|$ ,  $|M_B|$  toma el valor 2.5 (lo que significa que los espines son  $5/2$ ).  $|M_B|$  parece caer hacia su valor mínimo menos abruptamente que  $|M_A|$ . A medida que aumenta la temperatura las subredes alcanzan sus valores de saturación a valores más altos de  $|h'|$ . En la Fig. 3.3 mostramos las gráficas del valor absoluto de la magnetización total,  $|M_T|$  vs  $h'$ , para diferentes valores de  $k_B T'$ . Observe que en todos los casos,  $|M_T|$  da un salto alrededor de  $h' = 10$ . Dicho salto se vuelve más abrupto a medida que disminuye la temperatura, lo que sugiere, como antes, una discontinuidad a ese valor de  $h'$ . El valor de saturación de  $|M_T|$  a todas las temperaturas para campos grandes es siempre 2, como se espera para un modelo  $(3/2 - 5/2)$  con todos los espines alineados con el campo. A medida que  $T$  aumenta, se requieren valores mayores de  $h'$  para alcanzar el valor de saturación. El recuadro en la Fig. 3.3 es una ampliación de la región donde están presentes las otras discontinuidades (a bajas temperaturas). Como veremos, esto se debe a las inversiones de espín que se acentúan más para la subred  $B$  que contiene los espines más grandes.

Nuestros resultados para la magnetización total con  $h \geq 0$ , se comportan cualitativamente similar a los reportados en [8] para un sistema de espín mixto  $(1/2-3/2)$  en una aproximación de red de Bethe y para el mismo sistema resuelto empleando la teoría de campos efectivos [44]. Estos modelos calculados con enfoques de campo medio no muestran inversión de espín en las magnetizaciones de la subred. Sin embargo, la Fig. 6(a) de [44] muestra que a altas temperaturas hay una pequeña caída en la magnetización de la red de espín  $-3/2$  (subred de espines más grandes), similar a la caída que vemos en la figura Fig. 3.2 en nuestra red de espines más grandes.

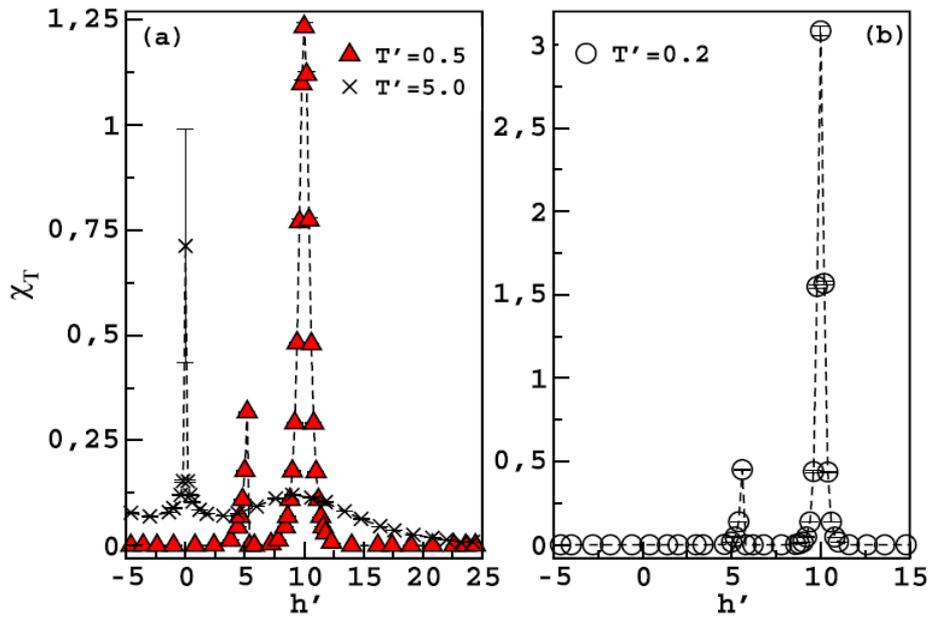


Figura 3.4: Dependencia de la susceptibilidad magnética por espín con el campo magnético longitudinal, para diferentes valores de la temperatura. Para  $k_B T' = 0.2, 0.5$ , los picos más pequeños cerca de  $h' = 5$  indican la inversión de las magnetizaciones de la subred. La transición ocurre en  $h' = 10$ .

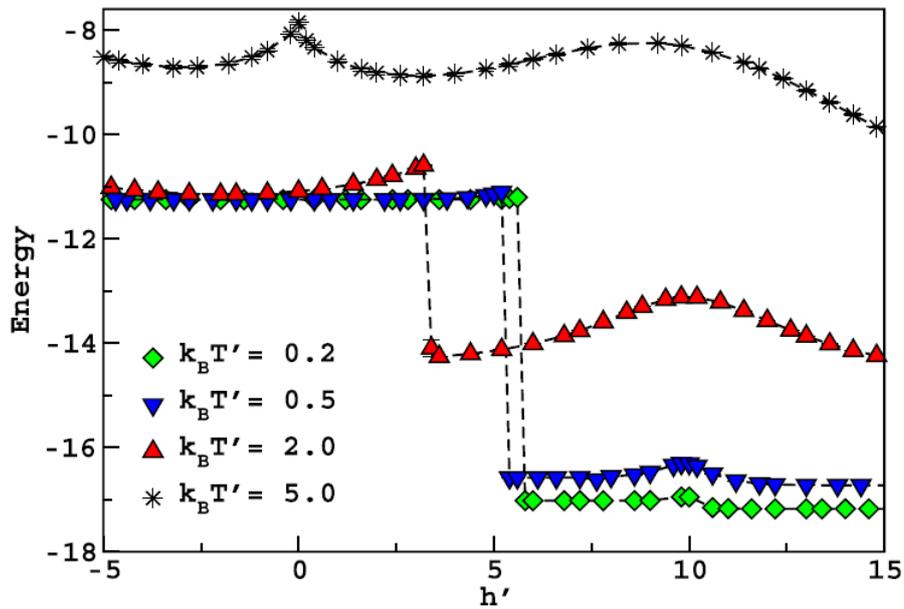


Figura 3.5: Dependencia de la energía por espín con el campo magnético longitudinal externo  $h'$ .

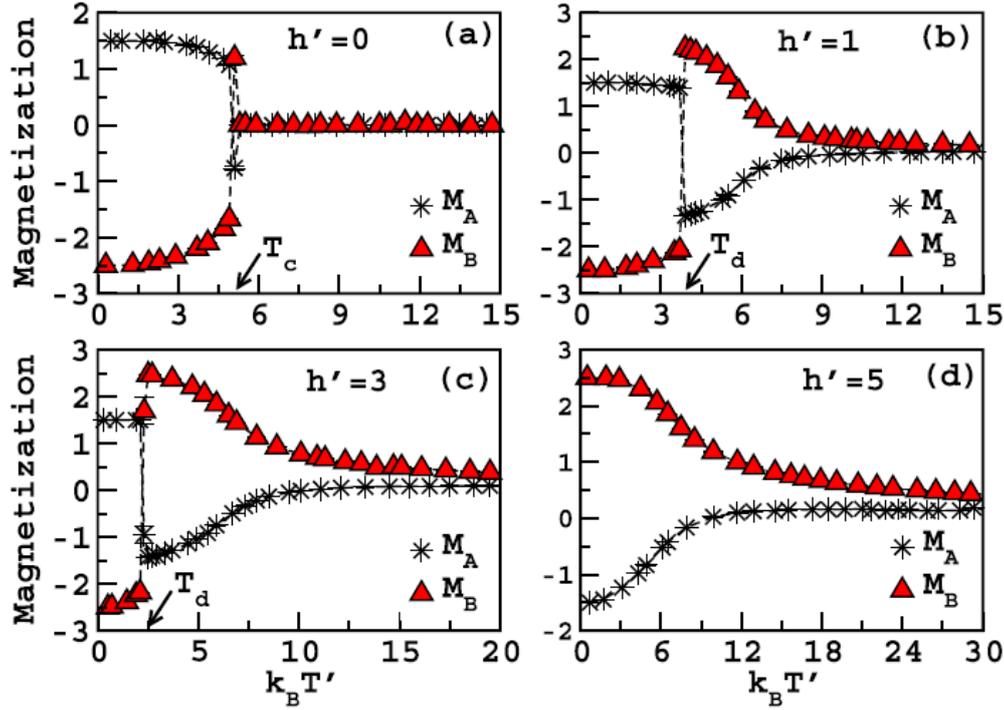


Figura 3.6: Dependencia de las magnetizaciones de las subredes  $M_A$  y  $M_B$  por espín con la temperatura. En (a) para  $h' = 0$ ,  $k_B T'_c$  es la temperatura crítica donde el sistema experimenta una transición continua. En (b) y (c) para  $h' > 0$ ,  $k_B T'_d$  indica la temperatura a la cual ocurre la inversión de los espines en la subred. En (d) para valores grandes de  $h'$  los espines se invierten, por lo que el sistema pasa suavemente a un estado desordenado al variar  $T'$ .

La dependencia de la susceptibilidad magnética total,  $\chi_T$ , con respecto al campo  $h'$  se puede apreciar en la Fig. 3.4 para varias temperaturas. Los picos más grandes en la susceptibilidad indican una transición de fase. A bajas temperaturas esta transición parece ocurrir cerca de  $h' \approx 10$ , mientras que para temperaturas más grandes se desplaza hacia  $h' = 0$ . Los picos más pequeños que se muestran a bajas temperaturas son evidencia de las discontinuidades en la magnetización total. En la Fig. 3.5 presentamos la dependencia de la energía con  $h'$  para varios valores de la temperatura. Curiosamente, aquí la disminución abrupta de la energía se produce en los valores de  $h'$  donde se producen los saltos de la subred  $B$ , mientras que en  $h' = 10$  solo se observa un salto muy pequeño. Creemos que esto se debe a la inversión de los espines de un estado metaestable a un estado estable que, por supuesto, tiene una energía más baja. La energía del sistema disminuye a medida que aumenta  $h' > 0$ , esto se espera ya que la interacción con el campo que alinea los espines se vuelve más fuerte que la interacción antiferromagnética,  $J_{AB}$ .

A continuación analizamos la dependencia de  $M_A$ ,  $M_B$ ,  $M_T$  y  $\chi_T$  con la temperatura para varios valores de  $h'$ . Cuando  $h' = 0$ , Fig. 3.6(a), vemos la transición esperada de segundo orden de una red ordenada antiferromagnética a una desordenada. Cuando incrementamos el valor del campo para valores no muy grandes ( $h' = 1, 3$ ) Fig. 3.6(b) y (c), la transición se suaviza, y tenemos un punto que llamamos  $T_d$  donde ocurre una inversión de las magnetizaciones de las subredes. Cabe destacar que

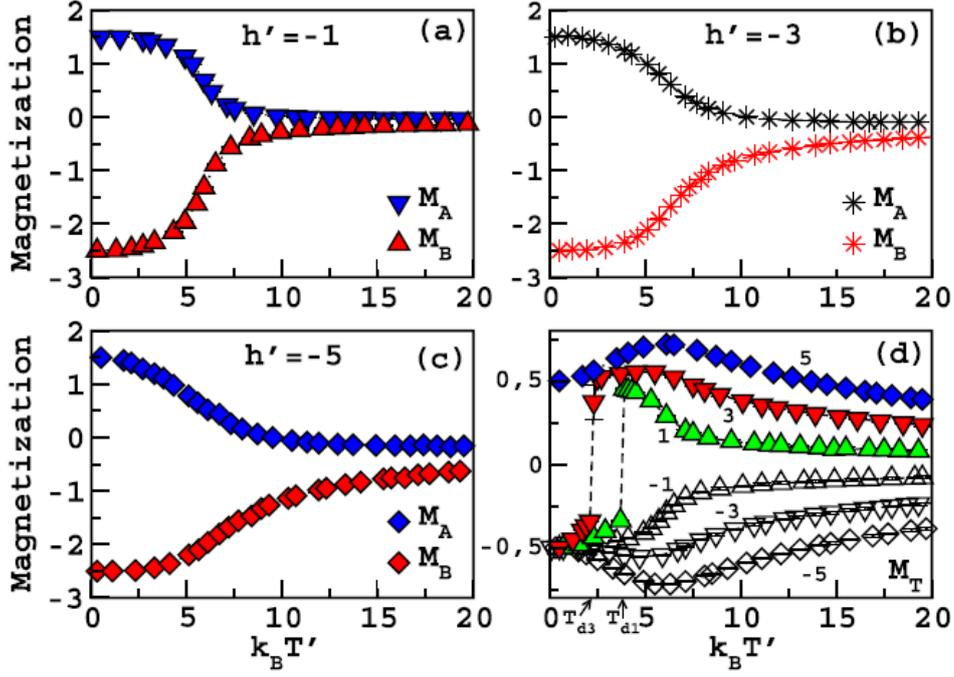


Figura 3.7: En (a), (b) y (c) la dependencia con la temperatura de las magnetizaciones de las subredes por espín, para  $h' < 0$ . En (d) la magnetización total por espín vs  $k_B T'$ . Los números indican los valores de  $h'$ .  $k_B T'_{d1}$  y  $k_B T'_{d3}$  indican las temperaturas a las que ocurre la inversión de los espines.

$T_d$  no es un punto crítico en el sentido de que el sistema no pasa de una fase ordenada a una desordenada. En  $T_d$ , el sistema permanece ordenado, se desordena a temperaturas más altas. Este comportamiento se ha observado antes en sistemas de espines mixtos en presencia de campos magnéticos [33, 34, 73, 74]. La razón de este comportamiento es el efecto competitivo entre el campo magnético y la interacción antiferromagnética. Para  $T < T_d$ , prevalece el acoplamiento de intercambio y el sistema puede permanecer en un estado metaestable donde los espines son antiparalelos pero la magnetización total no está alineada con el campo, mientras que para  $T > T_d$  domina el campo longitudinal. Para valores suficientemente grandes de  $h' > 0$  y para  $h' < 0$  (Fig. 3.6(d) y Fig. 3.7(a)-(c)), esta inversión de los espines desaparece y, a medida que aumenta la temperatura, el sistema pasa suavemente a un estado desordenado. La magnetización total se muestra en la Fig. 3.7(d), donde nuevamente vemos el comportamiento ya descrito. Un trabajo de Reyes et al. muestra que en presencia de campos cristalino y magnético, el sistema mixto ( $3/2 - 5/2$ ) presenta una inversión de los espines incluso en el caso en que  $h' < 0$  [33]. En ese trabajo no se analizó el caso presentado aquí, donde hay un campo externo, pero no hay campos cristalinos. Los campos cristalinos representan otra interacción competitiva que puede inducir la inversión del espín incluso para  $h' < 0$ . Estudios previos basados en la teoría del campo medio predicen la existencia de varias temperaturas de compensación para este sistema [46]. Teniendo en cuenta los resultados actuales y los de [33], concluimos que las predicciones de campo medio no fueron correctas. La presencia de múltiples puntos de compensación y la inversión de las magnetizaciones para  $h' < 0$ , parecen estar asociadas a la existencia de campos cris-

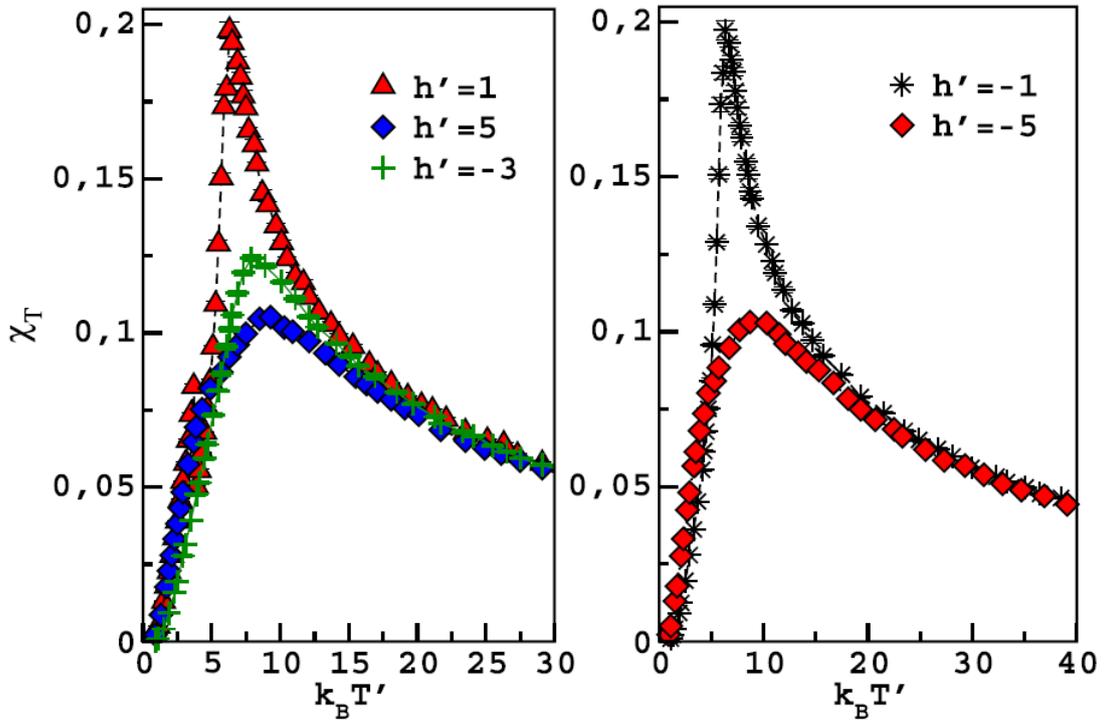


Figura 3.8: dependencia de la susceptibilidad magnética por espín con la temperatura, para varios valores de  $h'$ .

talinos. Los estudios sobre el comportamiento de compensación del sistema mixto  $(1/2 - 5/2)$  [34] y de espines mixto  $(1/2 - 1)$  [45], encontraron puntos de compensación cuando los campos cristalinos y los campos longitudinales externos estaban presentes (además de la interacción de intercambio antiferromagnético entre vecinos más cercanos). La ausencia de puntos de compensación en nuestro modelo sugiere fuertemente que la sola presencia de un campo magnético no puede inducir temperaturas de compensación, es decir que son necesarias otras interacciones como campos cristalinos o interacciones de mayor alcance entre los espines. Existe cierta evidencia experimental de que puede producirse una reversión de las magnetizaciones de subredes a bajas temperaturas [41–43].

El comportamiento térmico de la susceptibilidad magnética total por espín,  $\chi_T$ , se presenta en la Fig. 3.8 para varios valores de  $h'$ . El pico de las curvas señala una transición que se suaviza a medida que  $h'$  aumenta (el valor máximo de  $\chi_T$  disminuye a medida que  $|h'|$  aumenta), y proporciona una estimación de la temperatura crítica,  $k_B T'_c$ . Parece ser que  $k_B T'_c$  es independiente del signo de  $h'$  y aumenta cuando  $|h'|$  aumenta. Este comportamiento se reportó en el sistema de espines  $(1/2, 3/2)$  [44].

En la Fig. 3.9 resumimos el comportamiento de la temperatura  $k_B T'_c$  a la cual ocurren los máximos de la susceptibilidad, como una función del campo magnético  $h'$ . Como ya vimos, esta temperatura es independiente del signo de  $h'$  y se incrementa con  $|h'|$ , teniendo su valor mínimo en  $h' = 0$ . Se observó un comportamiento similar en [44] para un sistema de espín  $(1/2 - 3/2)$ .

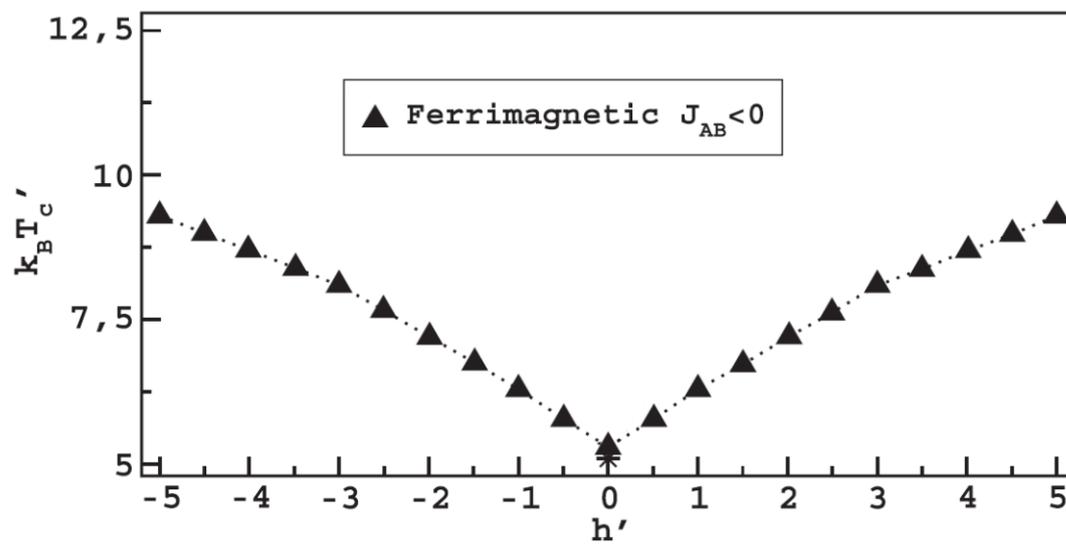


Figura 3.9: Dependencia de la temperatura de transición  $k_B T'_c$  con el campo magnético longitudinal, estimada a partir de los picos de  $\chi_T$

# Capítulo 4

## Conclusiones

Realizamos simulaciones Monte Carlo basadas en un algoritmo tipo baño térmico, para estudiar el comportamiento magnético de un modelo de Ising mixto constituido por dos subredes cuadradas, una con espines  $S = 3/2$  y la otra subred con espines  $\sigma = 5/2$ . Estas subredes se encuentran intercaladas de manera que la interacción a primeros vecinos se produce entre espines distintos, ( $S \leftrightarrow \sigma$ ). El Hamiltoniano del sistema incluye una interacción de intercambio a primeros vecinos,  $J_{AB}$  y un campo longitudinal externo,  $h'$ . Estudiamos el caso donde la interacción es ferrimagnética,  $J_{AB} < 0$ . Calculamos la magnetización total y las magnetizaciones individuales de las subredes, la susceptibilidad magnética y la energía, primero manteniendo la temperatura constante y cambiando  $h'$ , y segundo manteniendo  $h'$  constante y cambiando la temperatura. Encontramos que cuando  $h' > 0$  y no muy grande, el sistema presenta una inversión de los espines, a una temperatura,  $k_B T'_d$  más baja que la temperatura crítica,  $T_c$ . Este efecto no ha sido observado por otros autores que estudiaron sistemas mixtos similares con teorías de campo medio. Sin embargo, J. Reyes, N. De La Espriella y G. Buendía, en un trabajo previo descubrieron que en presencia de campos cristalinos el efecto también aparece para  $h' < 0$ , lo que sugiere que este fenómeno también puede ser inducido por los campos cristalinos [33]. Además, encontramos que la presencia de un campo magnético suaviza la transición entre la fase ordenada (baja temperatura) y la paramagnética (alta temperatura). Nuestro estudio indica que la presencia de un campo magnético no es suficiente para inducir puntos de compensación en un modelo de Ising mixto ferrimagnético, se necesitarán campos cristalinos o interacciones de mayor alcance. Finalmente, presentamos un diagrama de fase con las temperaturas críticas en términos del campo magnético.

# Apéndice A

## Solución analítica a los modelos de Ising 1D y 2D

### A.1. Modelo de Ising en una dimensión: solución exacta

En mecánica estadística se considera que un problema está resuelto cuando se ha evaluado su función de partición exacta,  $Z$ , ya que esta contiene toda la información referente al sistema.

Además de las dificultades conceptuales de la mecánica estadística, no existe un procedimiento estándar para calcular la función de partición. A pesar de la aparente simplicidad del modelo de Ising podemos encontrar soluciones exactas solo en una dimensión y en dos dimensiones en ausencia de un campo magnético.

#### A.1.1. La cadena de Ising

A continuación describimos varios métodos para obtener soluciones exactas del modelo de Ising unidimensional e introducimos una cantidad física adicional de interés.

##### Enumeración exacta

El ensamble canónico es la opción natural para calcular las propiedades termodinámicas del modelo de Ising [75]. El cálculo de la función de partición  $Z_N$  es directo en principio. El objetivo es enumerar todos los microestados del sistema y las energías correspondientes, calcular  $Z_N$  para  $N$  finito y luego tomar el límite  $N \rightarrow \infty$ . La dificultad es que el número total de estados,  $2^N$ , son demasiado para  $N \gg 1$ . Sin embargo, para el modelo de Ising unidimensional (cadena de Ising) podemos calcular  $Z_N$  para  $N$  pequeño y ver rápidamente cómo generalizar a un  $N$  arbitrario.

Para una cadena finita necesitamos especificar la condición límite para el espín en cada extremo. Una posibilidad es elegir extremos libres para que el espín en cada extremo tenga solo una interacción (ver Fig. A.1(a)). Otra opción son las condiciones de contorno toroidales como se muestra en la Figura Fig. A.1(b). Esta elección

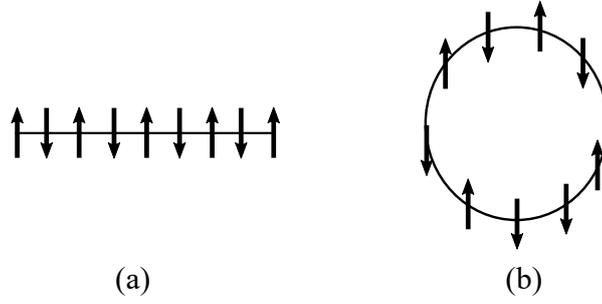


Figura A.1: (a) Ejemplo de condiciones de límite libre para  $N = 9$  espines. Los espines en cada extremo interactúan con solo un espín. En contraste, todos los otros espines interactúan con dos espines. (b) Ejemplo de condiciones de contorno toroidales. El enésimo espín interactúa con el primer espín para que la cadena forme un anillo. Como resultado, todos los espines tienen el mismo número de vecinos y la cadena no tiene superficie

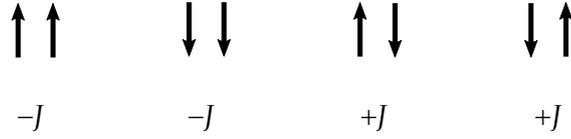


Figura A.2: Las cuatro configuraciones posibles de la cadena de Ising  $N = 2$ .

implica que el  $N$ -ésimo espín está conectado al primer espín, de modo que la cadena forma un anillo. La elección de las condiciones de contorno no importa en el límite termodinámico,  $N \rightarrow \infty$ )

La energía de la cadena de Ising en ausencia de un campo magnético externo está dada explícitamente por

$$H = -J \sum_{i,j \langle nm \rangle}^N s_i s_j \quad (\text{A.1})$$

Comenzamos calculando la función de partición para dos espines. Hay cuatro estados posibles: ambos espines arriba con energía  $-J$ , ambos espines abajo con energía  $-J$ , y dos estados con un espín hacia arriba y uno hacia abajo con energía  $+J$  (ver Fig. A.2). Así, recordando la definición de la función partición

$$Z = \sum_r e^{-\beta E_r}, \quad (\text{A.2})$$

$Z_2$  viene dado por

$$\begin{aligned} Z_2 &= e^{-\beta J} + e^{-\beta J} + e^{-\beta(-J)} + e^{-\beta(-J)} \\ &= 2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J} = 4 \cosh \beta J \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

De la misma manera podemos enumerar los ocho microestados para  $N = 3$ . Tenemos que

$$E = -J \sum_{i=1}^2 s_i s_{i+1} = -J(s_1 s_2 + s_2 s_3)$$

Tenemos ocho posibles estados:

$$\{s_1 s_2 s_3\} = \{\uparrow\uparrow\uparrow\}, \{\uparrow\uparrow\downarrow\}, \{\uparrow\downarrow\uparrow\}, \{\uparrow\downarrow\downarrow\}, \{\downarrow\uparrow\uparrow\}, \{\downarrow\uparrow\downarrow\}, \{\downarrow\downarrow\uparrow\}, \{\downarrow\downarrow\downarrow\}$$

Luego

$$E = \{-2J, 0, 2J, 0, 0, 2J, 0, -2J\}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} Z_3 &= e^{-2\beta J} + 1 + e^{2\beta J} + 1 + 1 + e^{-2\beta J} + 1 + e^{-2\beta J} \\ &= 2e^{-2\beta J} + 4 + 2e^{2\beta J} \\ &= 2(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^2 = 8(\cosh \beta J)^2 \\ &= 2(\cosh \beta J) Z_2 \end{aligned} \tag{A.4}$$

La relación entre  $Z_3$  y  $Z_2$  mostrada en la Ec. (A.4) sugiere una relación general entre  $Z_N$  y  $Z_{N-1}$ :

$$Z_N = (2 \cosh \beta J) Z_{N-1} = 2(2 \cosh \beta J)^{N-1} \tag{A.5}$$

Podemos derivar la relación de recurrencia de la Ec. (A.5) directamente escribiendo  $Z_N$  para la cadena Ising en la forma

$$Z_N = \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1}} \tag{A.6}$$

La suma sobre los dos estados posibles para cada espín produce microestados  $2^N$ . Para comprender el significado de las sumas en Ec. (A.6), la escribimos para  $N = 3$ :

$$Z_3 = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \sum_{s_3=\pm 1} e^{\beta J s_1 s_2 + \beta J s_2 s_3} \tag{A.7}$$

La suma sobre  $s_3$  se puede hacer independientemente de  $s_1$  y  $s_2$ , y tenemos

$$\begin{aligned} Z_3 &= \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} e^{\beta J s_1 s_2} \left[ e^{\beta J s_2} + e^{-\beta J s_2} \right] \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} e^{\beta J s_1 s_2} 2 \cosh \beta J s_2 = 2 \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} e^{\beta J s_1 s_2} \cosh \beta J. \end{aligned} \tag{A.8}$$

Hemos utilizado el hecho de que la función  $\cosh \beta J$  es par y, por lo tanto,  $\cosh \beta J s_2 = \cosh \beta J$  independientemente del signo de  $s_2$ . La suma sobre  $s_1$  y  $s_2$  en la Ec. (A.8) es directa, y encontramos

$$Z_3 = 2(\cosh \beta J) Z_2$$

Lo cual está en concordancia con la Ec. (A.4)

El análisis de la Ec. (A.5) procede de manera similar. Tenga en cuenta que el espín  $N$  ocurre solo una vez en el exponencial y tenemos, independientemente del valor de  $s_{N-1}$ ,

$$\sum_{s_N=\pm 1} e^{\beta J s_{N-1} s_N} = 2 \cosh \beta J \quad (\text{A.9})$$

Por lo tanto, podemos escribir  $Z_N$  como en la Ec. (A.5):

$$Z_N = (2 \cosh \beta J) Z_{N-1}$$

Podemos continuar este proceso hasta encontrar

$$\begin{aligned} Z_N &= (2 \cosh \beta J)^2 Z_{N-2} \\ &= (2 \cosh \beta J)^3 Z_{N-3} \\ &\vdots \\ &= (2 \cosh \beta J)^{N-1} Z_1, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

donde  $Z_1 = \sum_{s_1=\pm 1} 1 = 2$  y obtenemos el resultado de la Ec. (A.5). No hay factor de Boltzmann en  $Z_1$  porque con un espín no hay interacciones.

Podemos usar el resultado general (Ec. (A.5)), para  $Z_N$  para encontrar la energía libre de Helmholtz:

$$F = -k_B T \ln Z_N = -k_B T [\ln 2 + (N-1) \ln (2 \cosh \beta J)] \quad (\text{A.11})$$

En el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$ , el término proporcional a  $N$  en la ecuación anterior domina, y tenemos el resultado deseado [76]:

$$F = -k_B T \ln (2 \cosh \beta J) \quad (\text{A.12})$$

Apartir de esta última ecuación, podemos encontrar las variables termodinámicas del sistema [76].

## A.2. Modelo de Ising en dos dimensiones

La diferencia clave entre el caso unidimensional y bidimensional es que en una dimensión, la existencia de una pared de dominio permite que el sistema tenga regiones de espines hacia arriba y hacia abajo, y el tamaño de cada región se puede cambiar sin ningún costo de energía. Entonces, en promedio, el número de espines hacia arriba y hacia abajo es el mismo. En dos dimensiones, la existencia de un dominio no hace que la magnetización sea cero. Las regiones de espines descendentes

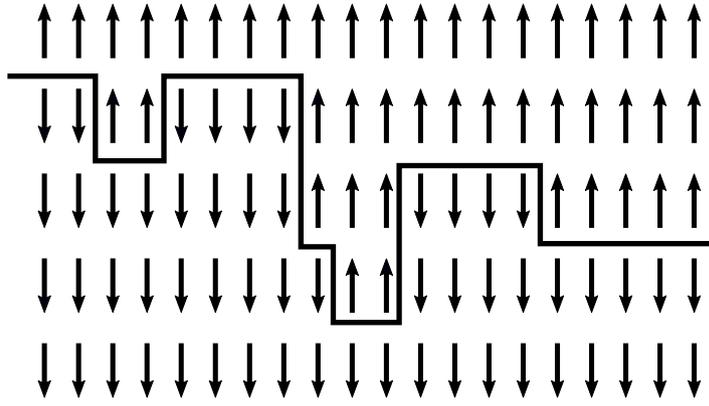


Figura A.3: Ejemplo de una pared de dominio en el modelo de Ising bidimensional.

no pueden crecer a baja temperatura porque la expansión requiere límites más largos y, por lo tanto, más energía.

En dos dimensiones, los puntos entre pares de espines de signos opuestos se pueden unir para formar líneas frontera que dividan la red en dominios (ver Fig. A.3). La magnetización neta es proporcional al área de los dominios positivos menos el área de los dominios negativos. En  $T = 0$ , todos los espines están en la misma dirección (positiva) y no hay líneas frontera. En  $T > 0$ , hay suficiente energía para crear líneas frontera y aparecerán dominios negativos. Si el perímetro de un dominio negativo es  $b$ , entonces la energía necesaria para crearlo es  $2Jb$ . Por tanto, la probabilidad de tener un dominio negativo es  $e^{-2\beta bJ}$ . Debido a que  $b$  debe ser al menos 4, es poco probable que las regiones negativas de un área grande tengan una temperatura baja. Por lo tanto, la mayoría de los espines seguirán siendo positivos y la magnetización seguirá siendo positiva [76].

### A.2.1. Solución de Onsager

Aunque la solución de Onsager tiene mucho interés histórico, las manipulaciones matemáticas son muy complicadas. Además, las manipulaciones son especiales para el modelo de Ising y no pueden generalizarse a otros sistemas. Por estas razones pocos trabajadores mecánico-estadísticos han analizado la solución de Onsager con gran detalle. A continuación damos solo los resultados de la solución bidimensional para una red cuadrada y nos concentramos en métodos de aproximación de aplicabilidad más general.

La temperatura crítica  $T_c$  está dada por

$$\sinh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1 \quad (\text{A.13})$$

o

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269 \quad (\text{A.14})$$

Es conveniente expresar la energía media en términos del parámetro adimensional  $\kappa$  definido como

$$\kappa = 2 \frac{\sinh(2\beta J)}{(\cosh(2\beta J))^2} \quad (\text{A.15})$$

En la Fig. A.4 se muestra un gráfico del parámetro  $\kappa$  frente a  $\beta J$ . Tenga en cuenta que  $\kappa$  es cero a temperaturas bajas y altas, y tiene un máximo de unidad en  $T = T_c$ .

La solución exacta para la energía  $E$  se puede escribir en la forma

$$E = -2NJ \tanh(2\beta J) - NJ \frac{\sinh^2(2\beta J) - 1}{\sinh(2\beta J) \cosh(2\beta J)} \left[ \frac{2}{\pi} K_1(\kappa) - 1 \right] \quad (\text{A.16})$$

donde

$$K_1(\kappa) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}} \quad (\text{A.17})$$

$K_1$  se conoce como la integral elíptica completa de primer tipo. El primer término en la Ec. (A.16) es similar al resultado en la Ec. (A.5) para la energía del modelo Ising unidimensional con una duplicación de la interacción de intercambio  $J$  para dos dimensiones. El segundo término en Ec. (A.16) desaparece a temperaturas bajas y altas (debido al término entre paréntesis) y en  $T = T_c$  debido a la desaparición del término  $\sinh^2(2\beta J) - 1$ . Sin embargo,  $K_1(\kappa)$  tiene una singularidad logarítmica en  $T = T_c$  en la que  $\kappa = 1$ . Por lo tanto, todo el segundo término se comporta como  $(T - T_c) \ln |T - T_c|$  en las cercanías de  $T_c$ . Concluimos que  $E(T)$  es continua en  $T = T_c$  y en todas las demás temperaturas.

La capacidad calorífica se puede obtener diferenciando  $E(T)$  con respecto a la temperatura. Después de una tediosa álgebra se puede demostrar que

$$C(T) = Nk_B \frac{4}{\pi} (\beta J \coth(2\beta J))^2 \left[ K_1(\kappa) - E_1(\kappa) - (1 - \tanh^2(2\beta J)) \left( \frac{\pi}{2} + (2 \tanh^2(2\beta J) - 1) K_1(\kappa) \right) \right], \quad (\text{A.18})$$

donde

$$E_1(\kappa) = \int_0^{\pi/2} d\phi \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi} \quad (\text{A.19})$$

$E_1$  se conoce como la integral elíptica completa de segundo tipo. Cerca de  $T_c$ ,  $C$  viene dada por

$$C \approx -Nk_B \frac{2}{\pi} \left( \frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \text{constante}. \quad (T \approx T_c) \quad (\text{A.20})$$

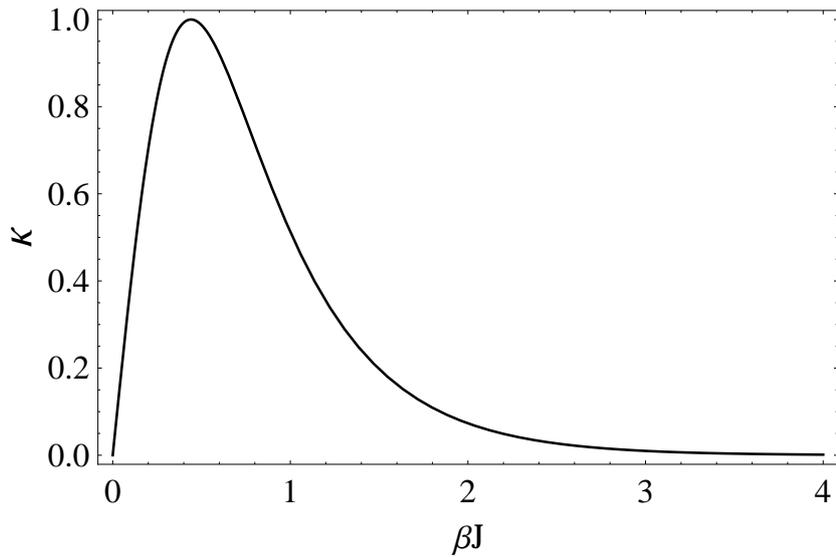


Figura A.4: Ejemplo de una pared de dominio en el modelo de Ising bidimensional.

La propiedad más importante de la solución de Onsager es que la capacidad calorífica diverge logarítmicamente en  $T = T_c$ :

$$C(T) \sim \ln |\epsilon| \quad (\text{A.21})$$

donde la diferencia de temperatura reducida viene dada por

$$\epsilon = \frac{T_c - T}{T_c} \quad (\text{A.22})$$

En 1952, **Cheng Yang** (octubre de 1922 (98 años)) pudo calcular la magnetización para  $T < T_c$  y la susceptibilidad de campo cero. El resultado exacto de Yang para la magnetización por espín se puede expresar como

$$m(T) = \begin{cases} 0, & \text{para } T > T_c \\ [1 - (\sinh(2\beta J))^{-4}]^{1/8}, & \text{para } T < T_c \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

# Apéndice B

## Descripción del método Monte Carlo

La idea básica de los métodos Monte Carlo es simular aleatoriamente las fluctuaciones térmicas desde un estado a otro sobre el curso de un experimento, y son útiles porque en la práctica es casi imposible calcular los promedios estadísticos de un observable en forma exacta, dada la alta dimensionalidad del espacio de fase. El objetivo final es evaluar cantidades físicas que aparecen como resultado de integraciones multidimensionales, tales como las de los valores promedios de los observables macroscópicos,  $\langle O(r^N) \rangle$ , de un sistema cuyo Hamiltoniano,  $H(r^N, p^N)$ , es conocido [77, 78]. En dichos sistemas el Hamiltoniano depende de un gran número de variables, y para el cálculo de los  $\langle O(r^N) \rangle$ , se integra sobre todos los puntos de  $\Gamma$ , de acuerdo con la definición:

$$\langle O \rangle = \frac{\int_{\Gamma} dr^N O(r^N) \exp[-\beta H(r^N)]}{Z} \quad (\text{B.1})$$

$$Z = \int_{\Gamma} dr^N \exp[-\beta H(r^N)] \quad (\text{B.2})$$

Donde  $r^N$  representa las coordenadas de las  $N$  partículas del sistema,  $Z$  es la función de partición canónica,  $\exp[-\beta H(r^N)]$  es el factor de Boltzmann y  $\beta = 1/k_B T$ , siendo  $k_B$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura del sistema [68].

El método Monte Carlo busca aproximar las integrales multidimensionales mostradas en la Ec. (B.1) y la Ec. (B.2) por una suma sobre un número finito de configuraciones que se usa como muestra estadística de todas las posibles configuraciones que se puedan dar en el sistema. Si esta muestra tiene  $M$  configuraciones, entonces el promedio del observable se puede expresar como:

$$\langle O \rangle \approx \frac{\sum_{n=1}^M O(r_n) \exp[-\beta H(r_n)]}{\sum_{n=1}^M \exp[-\beta H(r_n)]} \quad (\text{B.3})$$

La Ec. (B.3) se aproxima a la integral de la Ec. (B.1) cuando el sistema es muy grande; es decir, cuando  $M \rightarrow \infty$ . La forma de escoger la muestra estadística se puede hacer al azar, a través de un muestreo directo o mediante el llamado muestreo de importancia [77].

## B.1. Muestreo directo

En este tipo de muestreo se toman puntos del espacio de fase al azar y se pesan con el factor de Boltzmann,  $\exp[-\beta H(r^N)]$ . Este método es ineficiente, puesto que solamente los puntos que tengan el factor  $\exp[-\beta H(r^N)]$  grande contribuyen significativamente al promedio  $\langle O(r^N) \rangle$ . La técnica realmente falla debido a la variación rápida del factor de Boltzmann con relación a la energía, implicando que relativamente pocas de las configuraciones generadas son pesadas con un factor suficientemente grande para hacer una contribución significativa al promedio. Para obtener un resultado estadísticamente confiable tendríamos que utilizar un número enorme de configuraciones, lo que conlleva a caer en el problema original. Un aspecto negativo de este método, es que se pierde un gran esfuerzo computacional en generar configuraciones con contribuciones despreciables al promedio estadístico; es decir, el algoritmo gasta la gran mayoría de su tiempo en estados muy poco probables.

Visto lo anterior, se requiere de una variante del método que dé preferencia a aquellas regiones del espacio de fase que dan la mayor contribución al promedio del observable a una temperatura dada. A esta técnica se le llama ‘muestreo de importancia’ [68,79,80].

## B.2. Muestreo de importancia

El muestreo de importancia consiste en desarrollar un procedimiento que seleccione las configuraciones de acuerdo a una probabilidad,  $P(r_n)$ , siendo esta proporcional a la probabilidad en el equilibrio. Por ejemplo, si trabajamos en el rango del ensemble canónico, entonces esta probabilidad será proporcional a la probabilidad de Boltzmann,  $P_B$ :

$$P(r_n) \propto \frac{\exp[-\beta H(r_n)]}{Z} = P_B \quad (\text{B.4})$$

Si somos capaces de generar configuraciones en el espacio de fase con probabilidad  $P_B$ , entonces la ecuación (2.17) se puede expresar como un simple promedio aritmético:

$$\langle O \rangle \approx \frac{\sum_{n=1}^N O(r_n)}{N}, \quad (\text{B.5})$$

donde los puntos de  $\Gamma$  con los que se calcula el promedio, se escogen con la probabilidad  $P_B$  [68,80].

Cabe destacar que para generar las configuraciones con la probabilidad  $P_B$ , requerimos de una cadena de Markov, la cual es una secuencia de configuraciones definida por la configuración inicial  $C_0$  y una regla para indicar cómo se pasa a la siguiente configuración. La regla es llamada matriz estocástica o de transición y sus elementos dan la probabilidad  $W_{ij}$  de pasar de la configuración  $C_i$  a la  $C_j$ .

Los procesos de Markov se caracterizan porque la probabilidad de que el sistema esté en el estado  $C_{n+1}$  es independiente de los estados previos, se dice entonces que dichos procesos “no tienen memoria” la evolución del sistema no depende de la historia del mismo. Las condiciones que debe cumplir la probabilidad de transición por unidad de tiempo,  $W_{ij}$ , entre los estados Markovianos, para generar configuraciones con la probabilidad deseada son:

- $W_{ij}$  debe estar normalizada.
- $W_{ij}$  debe ser ergódica.
- $W_{ij}$  debe obedecer la ecuación maestra.

La descripción de cada una de estas condiciones se encuentra en [81]. A continuación presentamos una forma de realizar el muestreo de importancia del método Monte Carlo, también llamado algoritmo Metrópolis:

1. Seleccionar una configuración inicial  $C_0$  en el espacio de fase  $\Gamma$ .
2. Generar una nueva configuración  $C_j$  en dicho espacio.
3. Calcular la probabilidad de transición  $W_{ij} = W(C_i \rightarrow C_j) \propto \exp[-\beta\Delta H(r_n)]$ .
4. Generar un número aleatorio uniforme  $\eta$ , tal que  $0 \leq \eta < 1$ .
5. Si  $\eta \leq \exp[-\beta\Delta H(r_n)]$ , se acepta la nueva configuración, si no, la configuración no cambia. Note que las configuraciones que disminuyen la energía son siempre aceptadas.
6. Se almacenan los datos para calcular los valores promedios necesarios. Luego se regresa al paso 2 [81,82].

### **B.3. Descripción del algoritmo para modelos de Ising mixtos**

En el caso de un modelo de Ising mixto con espines diferentes, como el nuestro, se requieren algunos cambios al algoritmo estándar de Metrópolis; para ello planteamos seguidamente una solución al problema con un algoritmo más general.

### B.3.1. Algoritmo tipo baño térmico

En el modelo que estamos trabajando se tienen dos tipos de espines intercalados,  $S$  y  $\sigma$ ; los espines tipo  $S$  tienen 4 estados posibles, mientras que los espines tipo  $\sigma$  tienen 6, por lo que no podemos usar el algoritmo estándar de Metrópolis donde se elige 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 esta razón para la simulación usaremos un algoritmo tipo baño térmico que se considera como una extensión del algoritmo de Metrópolis estándar para sistemas en que los espines toman más de dos valores. En un algoritmo de baño térmico se elige un espín, y se calcula la probabilidad de que tome otro valor posible, incluso el mismo. De esta forma, en este tipo de algoritmos se elige la variable a la que se le va a dar la oportunidad de cambiar de valor y el resto del sistema, que permanece constante, actúa como un baño térmico que determina el posible nuevo valor de la variable elegida. La probabilidad de transición está determinada por la expresión:

$$W_{ij} = W(C_i \rightarrow C_j) \propto \exp[-\beta\Delta E_{ij}] \quad (\text{B.6})$$

Un ejemplo de cómo se utiliza el algoritmo baño térmico para el caso de un espín tipo  $\sigma$  se detalla a continuación:

1. Se elige al azar un espín  $\sigma$  de la red, entonces podría tomar uno de estos seis valores:  $\pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ .
2. Se calcula la diferencia de energía  $\Delta E$  y la probabilidad de transición  $\exp[-\beta\Delta E_{ij}]$  asociada a cada uno de los posibles cambios  $W_1, W_2, W_3, W_4, W_5$  y  $W_6$  respectivamente. Note que uno de estos  $W_i$  siempre toma el valor 1.
3. Se considera si se cambia a  $\sigma_1 = 5/2, \sigma_2 = 3/2, \sigma_3 = 1/2, \sigma_4 = -5/2, \sigma_5 = -3/2$  o  $\sigma_6 = -1/2$ .
4. Se genera un número  $\eta$  al azar, tal que  $0 < \eta < (W_1 + W_2 + W_3 + W_4 + W_5 + W_6)$ .
5. Si  $\eta < W_1$ , el espín queda como  $\sigma_1$ , si no, se avanza.
6. Si  $\eta < (W_1 + W_2)$ , el espín queda como  $\sigma_2$ , si no, se avanza.
7. Si  $\eta < (W_1 + W_2 + W_3)$ , el espín queda como  $\sigma_3$ , si no, se avanza.
8. Si  $\eta < (W_1 + W_2 + W_3 + W_4)$ , el espín queda como  $\sigma_4$ , si no, se avanza.
9. Si  $\eta < (W_1 + W_2 + W_3 + W_4 + W_5)$ , el espín queda como  $\sigma_5$ , si no, se cambia al espín  $\sigma_6$ .

Lo que realmente se hace en este algoritmo es dividir el intervalo  $(0, W_1 + W_2 + W_3 + W_4 + W_5 + W_6)$  en 6 regiones de ancho  $\exp[-\beta\Delta E_i]$  con  $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ . Al tomar un número al azar en este intervalo, la probabilidad de que caiga en una de las regiones es proporcional al ancho de ésta, o sea a  $\exp[-\beta\Delta E_i]$ .

El algoritmo garantiza que cuando el cambio de energía es desfavorable,  $\Delta E > 0$ , la probabilidad de transición,  $W_{ij}$ , disminuye exponencialmente con  $\Delta E$ . Mientras que si el cambio es favorable,  $W_{ij}$  aumenta exponencialmente con  $\Delta E$ . Además, existe siempre una probabilidad constante, cuando  $\Delta E = 0$ , de que el espín no cambie. Es importante resaltar que debido a que el algoritmo sólo genera configuraciones con la probabilidad de Boltzmann cuando alcanza el equilibrio, se deben realizar suficientes pasos Monte Carlo desde la configuración inicial, para asegurar que se ha alcanzado el equilibrio a la temperatura dada, a esto se le denomina comúnmente “calentamiento” del sistema.

Se considera como una nueva configuración la que se obtiene después de visitar en promedio todos los sitios de la red, y las cantidades físicas se calculan para cada configuración. El proceso de cambiar sólo un espín tiene la ventaja de ser muy rápido desde el punto de vista computacional, porque las interacciones para calcular la variación de energía son locales. En la práctica, al comienzo del programa se construye una tabla con todos los posibles valores de  $\Delta E$ , y los correspondientes  $\exp[-\beta\Delta E]$  para cada temperatura, lo que acelera mucho el cálculo. La desventaja de este algoritmo es que configuraciones sucesivas están fuertemente correlacionadas, dado que diferirán en el cambio de unos pocos espines, y hay que tener cuidado en calcular los errores estadísticos, debido a que muchas veces el sistema sólo ha evolucionado a través de una región muy reducida del espacio de fase.

En principio, los errores estadísticos pueden ser estimados simplemente tomando muchas mediciones de la cantidad en que estamos interesados, y calculando la dispersión de los valores. Este método es correcto si las distintas mediciones son independientes, lamentablemente tal como hemos dicho nuestras mediciones están fuertemente correlacionadas.

Una forma de estimar los errores es usando el método de bloques, en este caso los errores se pueden calcular dividiendo la muestra de “longitud”  $L$  en  $N_B$  bloques de longitud  $L_B = L/N_B$ , si  $L_B$  no es muy pequeña (mayor que la longitud de correlación) los promedios de los bloques pueden considerarse estadísticamente independientes. De esta manera, los errores se calcularán tomando los promedios de los bloques en vez de las mediciones originales. El promedio de un observable físico “ $O$ ” cualquiera se puede expresar como sigue:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N_B} \sum_{n=1,2,\dots,N_B} \langle O \rangle_n, \quad (\text{B.7})$$

donde  $\langle O \rangle_n$  es el promedio de la variable física  $O$  en el  $n$ -ésimo bloque; cabe destacar que este promedio es el mismo que se obtendría para las medidas originales, no obstante, la desviación standard es distinta. El valor promedio del cuadrado de “ $O$ ” viene dado por la expresión:

$$\langle O^2 \rangle = \frac{1}{N_B} \sum_{n=1,2,\dots,N_B} \langle O^2 \rangle_n, \quad (\text{B.8})$$

donde  $\langle O^2 \rangle_n$  es el promedio de  $O^2$  en el bloque  $n$ , y el error se puede calcular usando la ecuación siguiente:

$$\Delta O = \sqrt{\frac{1}{N_B(N_B - 1)} \sum_{n=1,2,\dots,N_B} (\langle O \rangle_n - \langle O \rangle)^2} \quad (\text{B.9})$$

La cual es equivalente a la expresión:

$$\Delta O = \sqrt{\frac{1}{N_B - 1} (\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2)} \quad (\text{B.10})$$

Al estimar el cálculo de errores estadísticos debemos tener presente que la selección de la longitud del bloque ( $L_B$ ) debe ser mayor que la longitud de correlación entre las medidas, lo que garantiza que las  $L_B$  sean estadísticamente independientes.

### B.3.2. Tiempo de correlación $\tau$ y la función de autocorrelación temporal $C_T(t)$

El tiempo de correlación,  $\tau$ , es una medida del tiempo que tarda el sistema para pasar de un estado a otro, significativamente diferente del primero. Una de las formas para estimar  $\tau$ , es asumir que es igual al tiempo que toma el sistema en alcanzar el equilibrio a una temperatura dada (tiempo de equilibración,  $\tau_{eq}$ ), esto es  $\tau_{eq} = \tau$ . Esta forma no es buena puesto que usualmente  $\tau_{eq} > \tau$ . La forma más directa de estimar el tiempo de correlación es calcular la función de autocorrelación temporal,  $C_T(t)$ , de alguna propiedad del modelo. Definimos a continuación para una cantidad física  $R$  del sistema, la función  $C_T(t)$  [83]:

$$C_T(t) = \frac{\langle R(t')R(t'+t) \rangle - \langle R(t') \rangle^2}{\langle R(t')^2 \rangle - \langle R(t') \rangle^2} \quad (\text{B.11})$$

Hay que diferenciar esta expresión de la función de correlación espín-espín dada por:

$$C(r_i, r_j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle \quad (\text{B.12})$$

Que mide la correlación espacial entre los espines sobre los sitios  $i$  y  $j$  de la red, con  $r_i$  el vector posición del sitio  $i$ ; la función  $C_T(t)$  da una medida similar de la correlación en dos tiempos diferentes. El tiempo de correlación  $\tau$  es la escala de tiempo sobre la cual la función  $C_T(t)$  disminuye significativamente; se espera que  $C_T(t)$  caiga en forma exponencial en un tiempo grande, así:

$$C_T(t) \sim \exp \left[ -\frac{t}{\tau} \right] \quad (\text{B.13})$$

La gráfica de  $C_T(t)$  vs  $t$  para alguna variable física del sistema nos proporciona un estimado de cuánto tiempo en pasos Monte Carlo (pmc) se requiere para obtener configuraciones estadísticamente independientes. En efecto, el valor de  $t$  en que la curva cae más rápidamente se define como  $\tau$ .

## B.4. Condiciones de Borde Periódicas

Debido a que las simulaciones se desarrollan en sistemas finitos, nos debemos preguntar sobre cómo tratar los bordes o fronteras de la red. Estos bordes pueden ser efectivamente eliminados envolviendo la red  $d$ -dimensional sobre un toro  $(d + 1)$ -dimensional. Esta condición de frontera determina una condición de borde periódica, dado que el primer espín en una fila “ve” el último espín de la fila como un vecino próximo y viceversa [68]. Lo mismo se cumple para espines en el tope y al final de una columna.

Este procedimiento efectivamente elimina los efectos de borde, pero el sistema está aún caracterizado por el tamaño  $L$  finito de la red, dado que el máximo valor de la longitud de correlación está limitado a  $L/2$  y las propiedades resultantes del sistema difieren de aquellas de la correspondiente red infinita. Se debe tener cuidado al usar las condiciones de borde periódicas debido a que si el estado ordenado del sistema tiene espines que alternan en signo de sitio a sitio, se puede introducir un “valor no deseado” si las dimensiones lineales de la red no se seleccionan correctamente. Por ejemplo, cuando se simula un sistema magnético, si este es ferromagnético es indiferente si  $L$  es par o impar, mientras que si es ferrimagnético, es indispensable que las dimensiones lineales sean pares; de no cumplirse esto al introducir las condiciones de borde periódicas la estructura de las dos subredes no podrá encajar en la red.

# Referencias bibliográficas

- [1] Fundación COTEC para la innovación tecnológica, Materiales Magnéticos, 1ra ed. (2003)
- [2] K. H. Buschow and F.R. de Boer, Physics of Magnetism and Magnetic Materials-Springer: 19 (2003)
- [3] N. A. Spaldin, Magnetic Materials, Fundamentals and Applications – 2nd edition: 96, 97 (2003).
- [4] M. Getzlaff, Fundamentals of Magnetism: 47, 62, 63 (2007)
- [5] C. P. Poole, Encyclopedic Dictionary of Condensed Matter Physics-Elsevier (2004)
- [6] D. Gatteschi, R. Sessoli and J. Villain, Molecular Nanomagnets - Oxford U. Press, (2006)
- [7] W. Jiang, C. Liu and Y. Jiang, Hysteresis loops and compensation behavior of cylindrical transverse spin-1 Ising nanowire with the crystal field within effective-field theory based on a probability distribution technique: Physica A 389 (2010) 2227.
- [8] C. Ekiz, Mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising system in a longitudinal magnetic field, J. Magn. Magn. Mater. 293 (2005) 913–923.
- [9] A. Zaim, M. Kerouad and Y. Belmamoun, Monte Carlo study of a mixed spin-1/2 and spin-1 Blume-Capel ferrimagnetic model with four-spin interaction, Phys. B 404 (2009) 2280–2284.
- [10] N. De La Espriella, C.A. Mercado, G.M. Buendía, Critical and compensation points of a mixed spin-2-spin-5/2 Ising ferrimagnetic system with crystal field and nearest and next nearest neighbors interactions, J. Magn. Magn. Mater. 417 (2016) 30–36.
- [11] Y. Hou, Q. Zhang and Y. Jia, Monte Carlo studies of the first order phase transitions on a mixed spin-2 and spin-5/2 system, Phys. B 442 (2014) 52–56.
- [12] W. Wang, D. Lv, F. Zhang, Jiang-lin Bi and Jun-nan Chen, Monte Carlo simulation of magnetic properties of a mixed spin-2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system in a longitudinal magnetic field, J. Magn. Magn. Mater. 385 (2015) 16–26.

- [13] A. Jabar, R. Masrouf, A. Benyoussef and 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.
- [14] De La Espriella and G.M. Buendía, Magnetic behavior of a mixed Ising 3/2 and 5/2 spin model, *J. Phys. Condens. Matter* 23 (2011) 176003.
- [15] M. Ertas, Dynamic hysteresis behaviors for the two-dimensional mixed spin (2,5/2) ferrimagnetic Ising model in an oscillating magnetic field, *Superlattices Microstruct.* 85 (2015) 734–742.
- [16] Q. Zhang, G. Wei and Y. Gu, The study of the phase diagram and internal energy of the mixed spin-3/2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system with interlayer coupling by effective-field theory; a simple approach of calculating internal energy, *Phys. Stat. Sol. B* 242 (2005) 924–932.
- [17] Z.H. Yang, Z.W. Li, L. Liu and L.B. Kong, Microstructure and magnetic properties of *Co – Cu* nanowire arrays fabricated by galvanic displacement deposition, *J. Magn. Magn. Mater.* 323 (2011) 2674–2677.
- [18] K.H. Seong, J.Y. Kim, J.J. Kim, et al., Room-temperature ferromagnetism in Cu doped GaN nanowires, *Nano Lett.* 7 (2007) 3366–3371.
- [19] L. Zhang, Y. Zhang, Fabrication and magnetic properties of *Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>* nanowire arrays in different diameters, *J. Magn. Magn. Mater.* 321 (2009) L15–L20.
- [20] A. Shavel, B. Rodríguez-González, M. Spasova, M. Farle and L.M. Liz-Marzán, Synthesis and characterization of Iron/Iron oxide core/shell nanocubes, *Adv. Funct. Mater.* 17 (2007) 3870–3876.
- [21] F. Kronast, N. Friedenberger, K. Ollefs, S. Gliga, et al., Element-specific magnetic hysteresis of individual 18 nm Fe nanocubes, *Nano Lett.* 11 (2011) 5–1710.
- [22] A.P. LaGrow, B. Ingham, S. Cheong, G.V.M. Williams, et al., Synthesis, alignment, and magnetic properties of monodisperse nickel nanocubes, *J. Am. Chem. Soc.* 134 (2012) 855–858.
- [23] M. El Hamri, S. Bouhou, I. Essaoudi, A. Ainane and R. Ahuja, Investigation of the surface shell effects on the magnetic properties of a transverse antiferromagnetic Ising nanocube, *Superlattices Microstruct.* 80 (2015) 151–168.
- [24] T. Kaneyoshi, Ferrimagnetic behaviors in a transverse Ising nanoisland, *Int. J. Modern Phys. B* 30 (2016) 1650073.
- [25] R.H. Kodama, Magnetic nanoparticles, *J. Magn. Magn. Mater.* 200 (1999) 359–372.
- [26] S.D. Bader, Opportunities in nanomagnetism, *Rev. Mod. Phys.* 78 (2006) 1.
- [27] N. Sounderya and Y. Zhang, Use of core/shell nanoparticles for biomedical applications, *Recent Pat. Biomed. Eng.* 1 (2008) 34–42.

- [28] H.T. Diep, Miron Kaufman and Sandra Kaufman, Dynamics of two group conflicts: a statistical physics model, *Phys. A* 469 (2017) 183–199.
- [29] N. De La Espriella and C.A. Mercado, J.C. Madera, Spin compensation temperatures in the Monte Carlo study of a mixed spin-2 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system, *J. Magn. Magn. Mater.* 401 (2016) 22–29.
- [30] N. De La Espriella, A.J. Arenas and M.S. Páez Meza, Magnetic properties of an Ising ferromagnetic model on a square lattice with next-nearest-neighbor and crystal field interactions, *J. Magn. Magn. Mater.* 417 (2016) 434–441.
- [31] E. Albayrak and A. Yigit, The phase diagrams of de mixed spin–3/2 and spin–5/2 Ising system on the Bethe lattice, *Physica status solidi b*: 244, 748–758 (2007)
- [32] B. Deviren and M. Keskin, Dynamic phase transitions and compensation temperatures in a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising system, *Journal of Statistical Physics*: 140, 934–947 (2010).
- [33] J. Reyes, N. De La Espriella and G. Buendía, Effects of an external magnetic field on a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising ferrimagnet: a Monte Carlo study, *Phys. Stat. Sol. B* 252 (2015) 2268–2274.
- [34] B. Deviren, M. Keskin and O. Canko, Magnetic properties of an anti-ferromagnetic and ferrimagnetic mixed spin-1/2 and spin-5/2 Ising model in the longitudinal magnetic field within the effective-field approximation, *Physica A*: 388, 1835–1848 (2009b).
- [35] E. Albayrak, The critical and compensation temperatures for the mixed spin–3/2 and spin–2 Ising model, *Phys. B Condens. Matter* 391 (2007) 47–53.
- [36] M. Keskin and M. Ertas, Mixed-spin ising model in an oscillating magnetic field and compensation temperature, *J. Stat. Phys.* 139 (2010) 333–344.
- [37] G.M. Buendía and E. Machado, Metastability and compensation temperatures for a mixed Ising ferrimagnetic system, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 224411–224417.
- [38] G.M. Buendía and M.A. Novotny, Numerical study of a mixed Ising ferrimagnet, *J. Phys. Conds. Matter* 9 (1997) 5951–5959.
- [39] M. Žukovič and A. Bobák, Phase diagram of a mixed spin-1 and spin-3/2 Ising ferrimagnet, *Phys. A* 389 (2010) 5402–5407.
- [40] G. Wei, Y. Gu and 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) 024422.
- [41] F. Albertini, et al., Magnetic-field-induced first-order transitions in the intermetallic compound  $Pr_2Fe_{17}$  *Phys. B Condens. Matter* 294 (2001) 172–176.
- [42] K. Koyama, et al., Magnetic phase transitions of  $Ce_2Fe_{17}$  under high pressures and high magnetic fields, *Phys. B Condens. Matter* 294 (2001) 168–171.

- [43] M. Doerr and S. Kramp, M. Loewenhaupt, et al., Anomalous magnetic behaviour of  $NdCu_2$  in high magnetic fields, *Phys. B Condens. Matter* 294 (2001) 164–167.
- [44] G.Z. Wei, Y.Q. Liang, Q. Zhang and Z.H. Xin, Magnetic properties of mixed-spin Ising systems in a longitudinal magnetic field, *J. Magn. Magn. Mater.* 271 (2004) 246–253.
- [45] C. Q. Xu and S. L. Yan, Compensation behaviors of mixed Ising model with transverse crystal field in an external magnetic field.
- [46] H.K. Mohamad, Spin compensation temperatures induced by longitudinal fields in a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising ferrimagnet: 323 (2011) 61–66.
- [47] J. Liu, G. Wei and H. Miao, Ground state phase diagrams and the tricritical behaviors of Ising metamagnet in both external longitudinal and transverse field, *J. Magn. Magn. Mater.* 315 (2007) 101–106.
- [48] Y. Liang, G. Wei, F. Ma and G. Song, Magnetic properties of a mixed spin-1/2 and spin-3/2 transverse Ising model in a longitudinal magnetic field, *Phys. A* 387 (2008) 4513–4518.
- [49] H.K. Mohamad, E.P. Domashevskaya and A.F. Klinskikh, Compensation temperatures induced by longitudinal fields in a mixed spin Ising ferrimagnet, *Solid State Commun.* 150 (2010) 1253–1257.
- [50] M.A. Neto and J.R. de Sousa, Phase diagrams of the transverse Ising antiferromagnet in the presence of the longitudinal magnetic field, *Phys. A* 392 (2013) 1–6.
- [51] M. Aouzi, M. El Hafidi and E.M. Sakhaf, Thermodynamic and magnetic properties of a mixed Ising system on a triangular array in presence of longitudinal field, *Phys. A* 345 (2005) 575–590.
- [52] M. Ertas, Y. Kocakapla and M. Keskin, Effective-field theory for dynamic phase diagrams of the kinetic spin-3/2 Blume-Capel model under a time oscillating longitudinal field, *J. Magn. Magn. Mater.* 348 (2013) 113–119.
- [53] T. Korkmaz and Ü. Temizer, Dynamic compensation temperature in the mixed spin-1 and spin-2 Ising model in an oscillating field on alternate layers of a hexagonal lattice, *J. Magn. Magn. Mater.* 324 (2012) 3876–3886.
- [54] M. Ertas and M. Keskin, Dynamic phase transition properties for the mixed spin- (1/2,1) Ising model in an oscillating magnetic field, *Phys. B Condens. Matter* 470–471 (2015) 76–81.
- [55] R. Weiss, A. Gold and J. Turner, Cytochromes  $c'$ : Biological Models for the  $S = 3/2, 5/2$  Spin-State Admixture? *Chem. Rev.:* 106 (6), 2550-2579 (2006).
- [56] M.E. Kosal and K.S. Suslick, Microporous porphyrin and metalloporphyrin materials, *J. Solid State Chem.* 152 (2000) 87–98.

- [57] L.P. Kadanoff, *Stat Physics, Statics Dynamics and Renormalization*. (2000).
- [58] M. Bojórquez, *Estudio de transiciones de fase en redes con interacciones de largo alcance* (2006).
- [59] H. Szymczak, *Magnetic Materials and Applications*: 204 Elsevier Ltd. (2005).
- [60] B. Cullity and C. Graham - *Introduction to Magnetic Materials*-Wiley-IEEE Press: 1,2,87,88 (2008).
- [61] R. E. Hummel, *Electric Properties of Materials – 4th edition*: 349,350 (2011)
- [62] P. Selwood, *Adsorption and Collective Paramagnetism*: (1962)
- [63] R. A. McCurrie, *The Structure and Properties of Ferromagnetic Materials - Academic Press*: 1,2,3 (1994).
- [64] N. De La Espriella, *Caracterización termomagnética de sistemas magnéticos tipo Ising*, Universidad de Córdoba: 1-5,20,21 (2019).
- [65] J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, 2nd Ed (1994).
- [66] L. Pili, *Acoplamiento spin-red en el modelo de Ising en dos dimensiones*, Universidad Nacional de La Plata: 1,2 (2017).
- [67] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd Edition, Massachusetts Institute of Technology: 443,444 (1987).
- [68] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics Third Edition*: 68, 69 (2009).
- [69] B. M. McCoy and Tai Tsun Wu, *The Two-Dimensional Ising Model*, Harvard University Press (2014).
- [70] A. Gelover, *Simulaciones del Modelo de Ising con el método de Monte Carlo*, Las prensas de Ciencias (2006).
- [71] N. De La Espriella and G. Buendía, *Ground state phase diagrams for the mixed Ising 3/2 and 5/2 spin model*, *Physica A*: 389, 2775-2732 (2010).
- [72] N. De La Espriella, G. Casiano y C. Ortega, *Propiedades Magnéticas del Sistema Ferrimagnético de Ising Mixto de Espines  $S = 3/2$  y  $\sigma = 5/2$* : *Información Tecnológica Vol. 23(2)*, 129-140 (2012).
- [73] B. Deviren, M. Bat and M. Keskin, *The effective-field study of a mixed spin–1 and spin–5/2 Ising ferrimagnetic system*, *Phys. Scr.* 79 (2009) 065006.
- [74] B. Deviren, E. Kantar and M. Keshin, *Magnetic Properties of a Mixed Spin–3/2 and Spin–2 Ising ferrimagnetic system within the effective-field theory*, *J. Korean Phys. Soc.* 56 (2010) 1738–1747.
- [75] R. H. Swendsen, *An Introduction to Statistical Mechanics and Thermodynamics 2th Ed - Oxford University Press* (2019).

- [76] H. Gould and J. Tobochnik, *Statistical and Thermal Physics With Computer Applications*-Princeton University Press (2010).
- [77] M.E. Newman and G.T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, New York, 2006.
- [78] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications*. Academic Press. A Division of Harcourt, Inc., (1998).
- [79] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Clarendon Press. Oxford, (1992).
- [80] D. W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*. Springer-Verlag, (1986).
- [81] B. A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and their Statistical Analysis*. World Scientific Publishing, (2004).
- [82] C. P. Robert and G. Casella. *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer, (1998).
- [83] G. Buendía and P. A. Rikvold, Dynamic phase transition in the two-dimensional kinetic Ising model in an oscillating field: Universality with respect to the stochastic dynamics. *Phys. Rev B.*, 78,051108, (2008).