



UNIVERSIDAD DE
CÓRDOBA



RFCB

Revista
Facultad de
Ciencias Básicas

Vol 2 No. 1- Edición digital ISSN: 2805-7821



Website: unijordoba.edu.co/index.php/revista-facultad-de-ciencias-basicas/ Email: revistabasicas@correo.edu.co

Single ion anisotropy effects on a ferrimagnetic integer-spins system

Efectos de anisotropía de ion simple sobre un sistema ferrimagnético de espines enteros

Nicolás De La Espriella Vélez¹, Julio Madera Yances², Rhonald Burgos³

^{1,3}Universidad de Córdoba, Colombia. Grupo Gamasco: ndelaespriella@correo.unicordoba.edu.co. ORCID¹: 0000-0001-7210-7649

²Universidad del Sinú-Elías Bechara Zainúm, Córdoba, Colombia. Grupo Teseeo, yancesm@gmail.com

³Universidad del Sinú-Elías Bechara Zainúm, Córdoba, Colombia. Grupo Gnocix, rhonaldburgos@unisnu.edu.co

Recibido: junio 16 de 2022

Aceptado: julio 26 de 2022

Publicado: julio 31 de 2022

Abstract

The objective of this research is to analyze the thermomagnetic effects of an external magnetic field (h) and single ion anisotropies (D_1 , D_2) on a ferrimagnetic system of alternating $S = 1$ and $\sigma = 2$ spins on a square lattice. The methodological analysis is done by means of phase diagrams of the magnetization, susceptibility and specific heat of the system, using computational simulations with Monte Carlo techniques and thermal bath type algorithms with periodic boundary conditions. Two ferrimagnetic models are considered: One with couplings between ions to first neighbors ($S \leftrightarrow \sigma$) and interactions of crystal (D_1 , D_2) and external magnetic (h) fields, which describe the model $J_1 - D_1 - D_2 - h$ (D_2 varies) and the second, with second-neighbor interactions for σ -type ions ($\sigma_i \leftrightarrow \sigma_j$) and crystal field interactions (D_1 , D_2) through the model $J_1 - J_3 - D_1 - D_2$ (D_1 varies). Critical temperatures, first order phase transitions and compensation temperatures are found. We note a strong relationship between the critical temperature and the anisotropy fields. Finally, non-critical peaks are observed at low temperatures due to spin rearrangement in the sublattices, a direct consequence of the crystal fields given in the Hamiltonian.

Keyword: Mixed Ising model; compensation temperature; critical temperature; anisotropy; magnetic field

Resumen

El objetivo de esta investigación es analizar los efectos termomagnéticos de un campo magnético externo (h) y de las anisotropías de ion simple (D_1 , D_2) sobre un sistema ferrimagnético de espines $S = 1$ y $\sigma = 2$ alternados sobre una red cuadrada. El análisis metodológico se hace mediante diagramas de fase de la magnetización, la susceptibilidad y el calor específico del sistema, utilizando simulaciones computacionales con técnicas Monte Carlo y algoritmos tipo baño térmico con condiciones de borde periódicas. Se consideran dos modelos ferrimagnéticos: Uno con acoplamientos entre iones a primeros vecinos ($S \leftrightarrow \sigma$) e interacciones de campos cristalinos (D_1 , D_2) y magnético externo (h), los cuales describen el modelo $J_1 - D_1 - D_2 - h$ (D_2 varía) y el segundo, con interacciones a segundos vecinos para los iones tipo σ ($\sigma_i \leftrightarrow \sigma_j$) e interacciones de campos cristalinos (D_1 , D_2) a través del modelo $J_1 - J_3 - D_1 - D_2$ (D_1 varía). Se hallan temperaturas críticas, transiciones de fase de primer orden y temperaturas de compensación. Notamos una fuerte relación entre la temperatura crítica y los campos de anisotropía. Finalmente, se observan a bajas temperaturas picos no críticos debido al reordenamiento de los espines en las subredes, consecuencia directa de los campos cristalinos dados en el Hamiltoniano.

Palabras claves: Modelo de Ising mixto; temperatura de compensación; temperatura crítica; anisotropía; campo magnético

INTRODUCCIÓN

Al abordar esta investigación enmarcada en la física de los sistemas magnéticamente ordenados, tales como las estructuras espintrónicas ferrimagnéticas, de gran utilidad en la tecnología moderna, el objetivo es analizar los efectos termomagnéticos sobre un sistema ferrimagnético de espines enteros $S = 1$ y $\sigma = 2$, ejercidos por los campos de anisotropía iónica de las subredes cuadradas A y B que componen la configuración cristalina, denotadas como D_1 y D_2 , respectivamente, y de un campo magnético externo (h).

El sistema ferrimagnético estudiado en este trabajo está formado por dos clases de átomos de espines enteros 1 y 2, intercalados en una red cuadrada finita. El ferrimagnetismo es un fenómeno físico en el que se produce ordenamiento magnético de los momentos magnéticos de una muestra de modo que todos están alineados en la misma dirección, pero no en el mismo sentido y con diferentes magnitudes (Getzlaff, 2008); es decir, las orientaciones son antiparalelas. Un ferrimagneto está formado por dos subredes ferromagnéticas de distintas magnitudes de espín.

Para el estudio de las estructuras magnéticas ferromagnéticas, antiferromagnéticas y ferrimagnéticas se han empleado en los últimos años modelos teóricos muy eficientes que complementan las investigaciones experimentales sobre estos sistemas complejos sustentados en redes cristalinas de diversas geometrías, tales como cadenas de momentos magnéticos en una dimensión, configuraciones cuadradas, cúbicas, triangulares, hexagonales, árboles de Bethe, etc. Dentro de estos modelos teóricos para caracterizar termomagnéticamente los sólidos cristalinos, se encuentran los de *Ising mixtos*, que emergen como “adecuados laboratorios” donde se muestran diversos fenómenos físicos útiles para la comprensión del magnetismo presente en las mencionadas configuraciones o redes cristalinas. Un sistema ferrimagnético tipo Ising consiste de un arreglo de átomos en una red bidimensional o tridimensional, donde se consideran diversas interacciones, enmarcadas en un Hamiltoniano, internas y/o externas entre los momentos magnéticos que conforman el material. En el caso que nos compete estudiaremos un

ferrimagneto tipo Ising mixto de espines $S = 1$ y $\sigma = 2$ estructurado en una red cuadrada. Cabe destacar que los modelos de Ising mixtos han probado ser de gran utilidad en la caracterización magnética de los complejos materiales magnéticos (De La Espriella, 2016; Žukovič and Bobák, 2016; Karimou and Bati, 2021), dado que se han obtenido interesantes resultados acerca de fenómenos críticos como comportamientos reentrantes, doblemente reentrantes y transiciones discontinuas (Magoussi et al., 2013; Temizer et al., 2016; De La Espriella et al., 2017), entre otros, en diversas redes cristalinas entre los que se destacan óxidos ferrimagnéticos amorfos con iones de Fe^{3+} (Htoutou et al., 2004).

Es grato considerar que el sistema con momentos magnéticos de espines 1 y 2 ha sido estudiado con mucho éxito por la riqueza de fenómenos físicos que experimenta, considerando diversas estructuras de red. Por ejemplo, Zhang et al (2004), estudiaron los diagramas de fase de la magnetización y la energía del modelo, Albayrak and Yigit (2005) analizaron puntos tricríticos y transiciones de primer orden y Wei et al (2006) describieron propiedades magnéticas de esta estructura de espines en presencia de distintas anisotropías (Wei et al., 2006). No menos importantes son las investigaciones sobre las temperaturas de transiciones dinámicas reportadas por Keskin et al (2009) y los comportamientos reentrantes del modelo estudiados por Deviren et al (2010). Así mismo, se pueden destacar los trabajos de Korkmaz y Temizer (2012), y los de Masrour et al (2015), quienes investigaron temperaturas de compensación dinámicas y comportamientos de histéresis en redes hexagonales, respectivamente. En años más recientes De La Espriella et al (2018a), encontraron que el modelo de espines (1,2) exhibe comportamientos reentrantes y de compensación de espín y tiene diversos diagramas de fase de estado base de acuerdo con los parámetros del Hamiltoniano de interacciones (De La Espriella et al (2018b).

Aparentemente el análisis termomagnético de un sistema de espines enteros, como el ferrimagneto tipo Ising con redes de momentos magnéticos $S = 1$ y $\sigma = 2$, pareciera que no tiene importancia porque aún no se

ha reportado en la literatura, hasta donde conocemos, ningún compuesto o material que contenga este tipo de espines o esté estructurado con ellos. Pero este trabajo se justifica por la variedad de fenómenos físicos que hemos hallado en este modelo, por ejemplo puntos de compensación (T_{comp}), es decir temperaturas por debajo de la temperatura crítica (T_c) a la cual la magnetización total es cero, pero el sistema permanece ordenado (De La Espriella et al., 2019; De la Espriella et al., 2021; Kageyama et al., 2003); transiciones discontinuas y continuas, las primeras muy útiles en las grabaciones magneto-ópticas y de gran interés práctico en el almacenamiento de datos magnéticos y su manipulación (Ostler et al., 2012; Barker et al., 2013) y las segundas, eficientes en la determinación de la transición de la fase ferrimagnética a la fase paramagnética, cuando el material se halla totalmente desordenado (De La Espriella et al., 2021). Además, los resultados teóricos obtenidos podrían servir como base de futuras investigaciones experimentales sobre compuestos con la configuración espintrónica $S = 1$ y $\sigma = 2$. La situación problemática que se plantea en este trabajo de investigación está enmarcada en la pregunta: ¿Qué efectos producen un campo magnético externo y las anisotropías de ion simple o campos cristalinos de las subredes que conforman un sistema ferrimagnético de espines $S = 1$ y $\sigma = 2$, sobre la magnetización, la susceptibilidad magnética y el calor específico del modelo?

MATERIALES Y MÉTODOS

Los materiales usados para el desarrollo de esta investigación se basan en dos servidores computacionales tipo MultiProcessor SYS-2049U-TR4, para caracterizar numéricamente un sistema ferrimagnético tipo Ising de $3/2$ y $7/2$, alternados sobre una red cuadrada de 14.400 sitios. El Hamiltoniano que define las interacciones está definido como:

$$H = -J_1 \sum_{\langle nm \rangle} S_i \sigma_j - J_3 \sum_{\langle nmn \rangle} \sigma_i \sigma_j - D_1 \sum_i S_i^2 - D_2 \sum_j \sigma_j^2 - h \left(\sum_i S_i - \sum_j \sigma_j \right) \quad (1)$$

$S_i = \pm 3/2, \pm 1/2$ y $\sigma_j = \pm 7/2, \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$, son los espines sobre las subredes A y B respectivamente. J_1 y

J_3 representan los acoplamientos de intercambio entre pares de espines a primeros y segundos vecinos, D_1 y D_2 son los campos cristalinos de cada subred, generadores de las anisotropías del sistema. La primera suma se efectúa sobre todos los pares de espines con interacción a primeros vecinos, es decir, entre los sitios con espines $S_i = 3/2$ y $\sigma_j = 5/2$, la segunda suma se efectúa sobre todos los pares de espines con interacción a segundos vecinos en la subred B, es decir, entre los sitios con espines tipo σ . Las sumas $\sum_i$ y $\sum_j$ se realizan sobre todos los sitios de espines de las subredes A y B, respectivamente.

Escogemos un acoplamiento antiferromagnético a primeros vecinos, $J_1 < 0$, y adoptamos condiciones de borde periódicas. Todas las variables en el Hamiltoniano están en unidades de energía. La simulación del modelo, descrito por el Hamiltoniano, se lleva a cabo mediante un método Monte Carlo, generando los estados aleatoriamente mediante un algoritmo tipo baño térmico. Se elige un espín al azar, y se calcula la diferencia de energía ΔE_{ij} y la probabilidad de transición $\exp(-\beta \Delta E_{ij})$, asociada a cada uno de los posibles cambios. Luego, se considera si el espín cambia su valor, generando un número aleatorio y , en el intervalo $(0, \Sigma P_i)$, donde ΣP_i , representa la suma de las probabilidades de transición. Los datos se generan con 4×10^5 pasos de Monte Carlo por sitio, después de descartar los primeros 10^5 pasos por sitio para alcanzar el equilibrio del sistema. El cálculo de errores se estima usando el método de bloques, donde se divide la muestra de tamaño L en n_B bloques de longitud $L_B = L/n_B$. Cuando L_B es mayor que la longitud de correlación, los promedios de los bloques se pueden considerar estadísticamente independientes. De esta forma, los errores se calculan tomando los promedios de los bloques en vez de las mediciones originales. Las barras de error se calculan agrupando todas las medidas en 10 bloques y tomando su desviación estándar (Newman and Barkema, 2006; De La Espriella (2012). El trabajo se llevó a cabo en el laboratorio GAMASCO de la Universidad de Córdoba-Montería-Colombia.

RESULTADOS

MODELO J_1 - D_1 - D_2 - h : Efectos del Campo Cristalino

D_2 . Esta sección muestra el comportamiento de la magnetización total y la susceptibilidad total por espín en función de la temperatura y el análisis del comportamiento de la temperatura crítica (T_C) en función de D_2 . Para este caso se consideran los parámetros del Hamiltoniano con los siguientes valores, $J_1 = -1$, $J_3 = 0$, $D_1 = -2.5$ y $h = 0$, cuando D_2 varía.

En las figuras 1 y 2, se observa que en el rango $-2 \leq D_2 \leq 4$, la magnetización total (M_T) aumenta desde $M_T(0) = 0$ en $T = 0$ (estado base) hasta alcanzar un valor máximo para luego decrecer hasta cero en $T = T_C$, donde el sistema exhibe un comportamiento paramagnético, con el aumento de la temperatura. También, se nota que para valores del campo cristalino comprendidos entre $-1 \leq D_2 \leq 2$ la temperatura crítica aumenta con el incremento D_2 , es decir, T_C se presenta a temperaturas cada vez más altas, que son estados de mayor energía. Por otro lado, para valores de $D_2 < 0$ la temperatura T_C decrece, como se observa en la figura 2. En este diagrama, se aprecia que para $D_2 < -1$, la magnetización total desaparece por completo, esto es, $M_T(T) = 0$, lo que indica que para estos valores del campo de anisotropía (D_2) el sistema se comporta como un paramagneto.

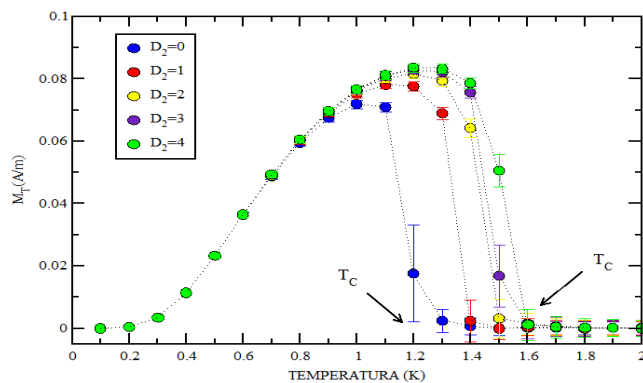


Figura 1: Comportamiento de la magnetización total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$ y D_2 varía. En el diagrama, los puntos de transición de fase se simbolizan con T_C .

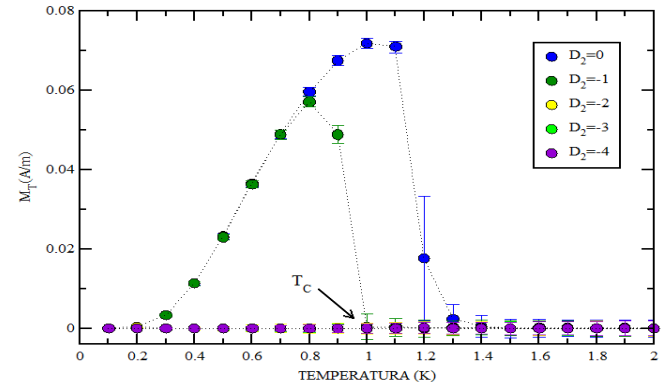


Figura 2: Comportamiento de la magnetización total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$ y D_2 varía ($D_2 \leq 0$). En el diagrama, los puntos de transición de fase se simbolizan con T_C .

En las figuras 3 y 4 se analizan las variaciones térmicas de la susceptibilidad magnética total por espín para diferentes valores del campo de anisotropía D_2 . En las curvas de χ_T (figura 3) se puede apreciar el típico comportamiento de la susceptibilidad en el límite $T \rightarrow T_C$. Vemos que la susceptibilidad se incrementa positivamente hasta alcanzar su máximo en $T = T_C$. Justo donde finaliza la fase ferrimagnética, tal que el sistema se desordena totalmente llegando a una fase paramagnética. Para $D_2 = -1$ se observa en la figura 4 que $T_C = 1$. En tanto que para $D_2 < -1$ se puede apreciar que χ_T aumenta mínimamente hasta alcanzar un valor constante, muy cercano a cero, para todos los valores de T .

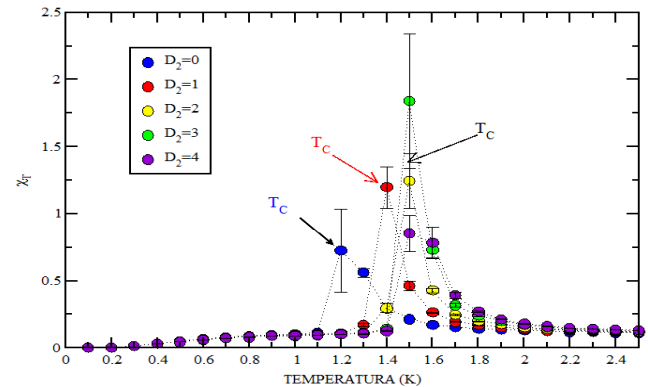


Figura 3: Comportamiento de la susceptibilidad total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$ y D_2 varía. T_C indica la temperatura de transición a la fase paramagnética.

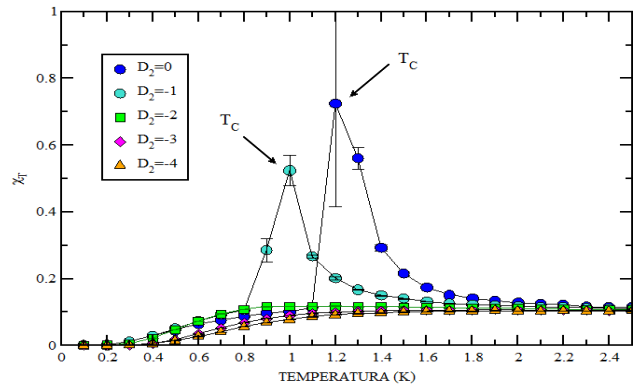


Figura 4: Comportamiento de la susceptibilidad total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$ y D_2 varía ($D_2 \leq 0$). T_C indica la temperatura de transición a la fase paramagnética.

A continuación, mostramos una descripción del comportamiento crítico del sistema ferrimagnético de espines $S = 1$ y $\sigma = 2$. En la figura 5, se observa una dependencia de la temperatura crítica con respecto al campo cristalino D_2 .

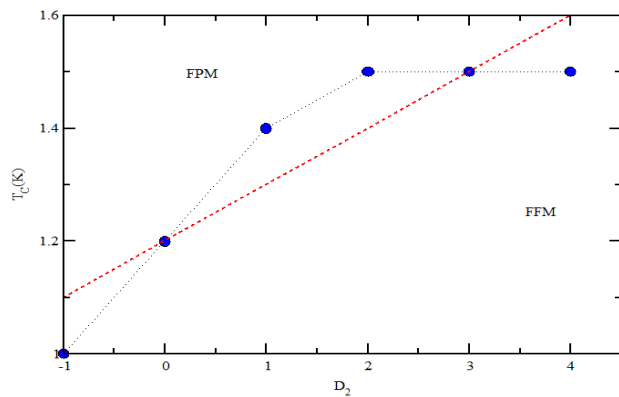


Figura 5: Dependencia de la temperatura crítica del sistema con relación al campo cristalino D_2 , con valores fijos $J_1 = -1$, y $D_1 = -2.5$.

A medida que se incrementa el campo, para valores entre $-1 \leq D_2 \leq 2$, la temperatura crítica crece. Luego para valores $D_2 > 2$, T_C adquiere un valor constante de $T_C = 1.5$. Además, podemos observar que la curva en la figura 5 divide dos regiones o fases, una paramagnética (FPM) y otra ferrimagnética (FFM). Por

encima de la curva de temperatura crítica se encuentra la fase paramagnética (FPM) donde el sistema está desordenado por completo, esto indica una orientación azarosa de los espines, en consecuencia, se podría afirmar que en esta región quien domina sobre el sistema es la energía térmica $k_B T$ ($T > T_C$). Por debajo de la curva de temperatura crítica se encuentra la fase ferrimagnética (FFM) aquí el sistema presenta un ordenamiento, los espines están orientados de tal manera que se favorece una magnetización espontánea debido a la diferencia en las magnitudes de los momentos magnéticos y a la magnetización residual de la interacción a primeros vecinos. Por lo tanto, la dirección privilegiada es tal que favorece que los espines se orienten antiparalelamente entre las subredes que forman el sistema. Esto es por efecto de los parámetros de interacción en el Hamiltoniano. La línea punteada en la figura 5 indica la linealización de la curva T vs D_2 .

MODELO J_1 - D_1 - D_2 - h : Efectos del Campo Magnético

externo h ($h = \pm 1$). En esta sección se muestra el comportamiento de la magnetización total y la susceptibilidad total, por espín, en función de la temperatura para los valores $J_1 = -1$, $D_2 = -2.5$ y $h = \pm 1$ (D_2 varía). También, se analiza el comportamiento de la temperatura crítica (T_C) en función de D_2 , teniendo en cuenta estos parámetros.

La figura 6 muestra el comportamiento de M_T para diversos valores de D_2 cuando $h = 1$. Se nota que la magnetización total (M_T) aumenta sutilmente desde su valor $M_T(0) = 0$ en el estado base, hasta alcanzar una transición de primer orden a una temperatura $T = T_t = 0.9$, luego la magnetización alcanza su valor máximo, para posteriormente decrecer hasta un valor aproximadamente constante en el rango $0.05 < M_T < 0.10$.

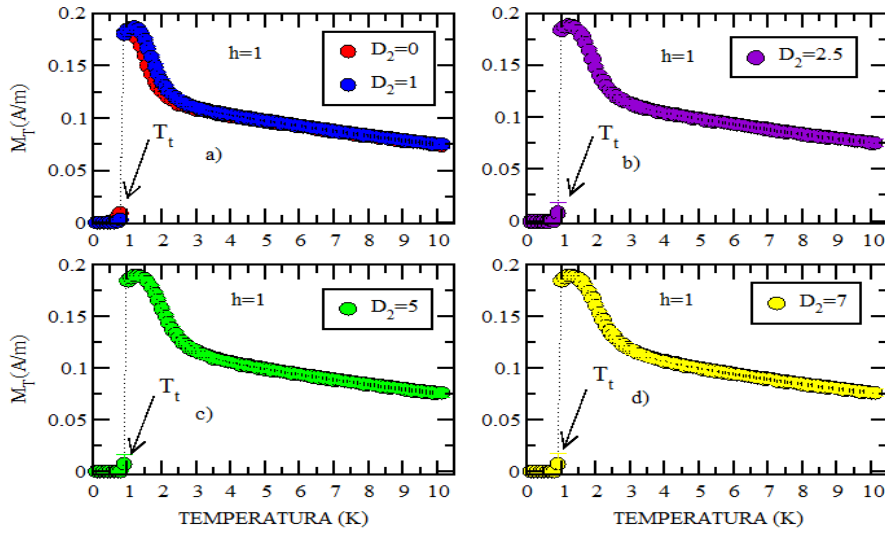


Figura 6: Comportamiento de la magnetización total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$, $h = 1$ y D_2 varía. En el diagrama podemos observar un punto de transición de fase de primer orden (discontinua) en T_t , para cada una de las curvas.

Para $h = -1$ en la figura 7 podemos apreciar que desaparece la transición de primer orden, aquí la magnetización total (M_T) se incrementa de manera continua hasta alcanzar un máximo, para luego decrecer hasta un valor en el intervalo $0.05 < M_T < 0.10$. Por otro lado, cuando comparamos las curvas de la magnetización total en las figuras 1, 6 y 7 para los valores del campo cristalino $D_2 = 0$ y $D_2 = 1$,

observamos que la acción de h es remover la temperatura crítica, mostrada en la figura 1. Estos resultados indican que cuando existe un campo externo, en nuestro caso $h = \pm 1$, el sistema siempre va a exhibir una magnetización neta

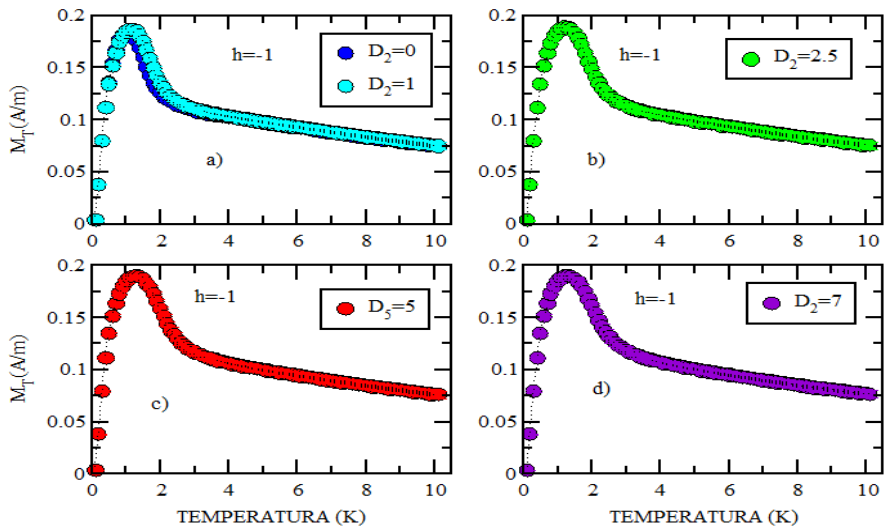


Figura 7: Comportamiento de la magnetización total por espín, como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$, $h = -1$ y D_2 varía. En el diagrama podemos observar que el punto de transición de fase de primer orden (discontinua) es removido por el campo magnético $h = -1$, para cada una de las curvas

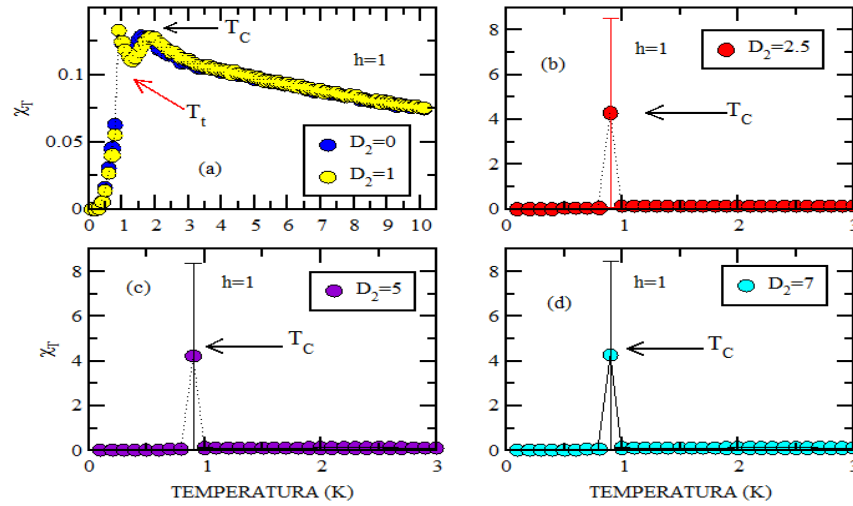


Figura 8: Comportamiento de la susceptibilidad total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$, $h = 1$ y D_2 varía. Los puntos de Curie y de transición de fase de primer orden se indican como T_C y T_t respectivamente.

En las figuras 8 y 9 analizamos las variaciones térmicas de la susceptibilidad magnética total por espín para diversos valores del campo cristalino D_2 . En el diagrama 8 (a) para D_2 , en el rango de valores $0 \leq D_2 \leq 1$ el sistema experimenta una transición de fase de primer orden (discontinua), aproximadamente en 0.9 ($T_t \approx 0.9$). La temperatura crítica es de $T_C = 1.6$ para $D_2 = 0$ y $T_C = 1.9$ para $D_2 = 1$. En las figuras 8 (b-d) la temperatura crítica es aproximadamente igual a 0.9

($T_C \approx 0.9$) y es independiente del campo cristalino D_2 . Lo anterior nos indica que para un valor crítico de D_2 la temperatura crítica se hace constante. Por otro lado, cuando $h = -1$, figura 9, podemos observar que la susceptibilidad se incrementa gradualmente con la temperatura hasta alcanzar un máximo en el punto de transición $T = T_C$ y luego decrece a valores distintos de cero para grandes temperaturas.

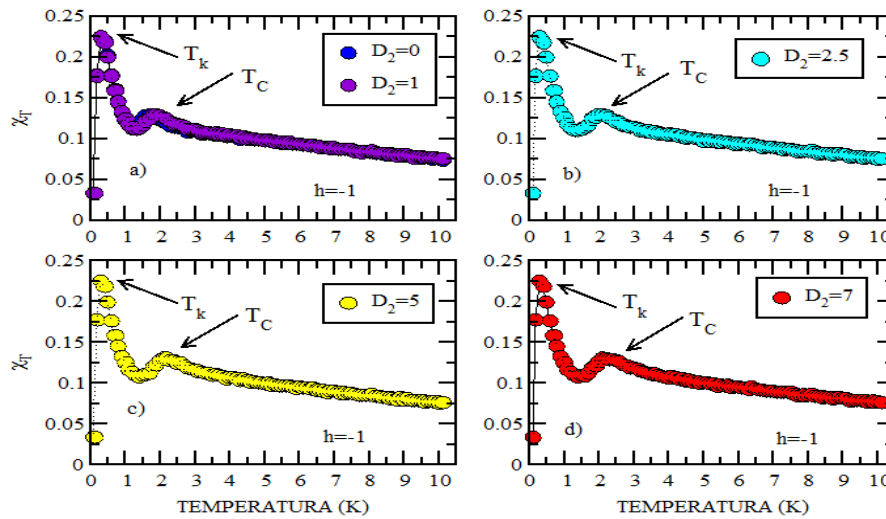


Figura 9: Comportamiento de la susceptibilidad total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$, $h = -1$ y D_2 varía. T_k representa temperaturas de picos no críticos y T_C es la temperatura de transición a la fase paramagnética.

En la figura 10 se resumen los resultados obtenidos sobre la dependencia de T_k y T_C con respecto a D_2 ($h = -1$). En el rango de valores estudiados de los parámetros del Hamiltoniano, podemos ver en la curva 10 (a), que a bajas temperaturas existen picos secundarios no críticos T_k , debido al reordenamiento térmico de los momentos magnéticos. Aquí se observa que estos picos no críticos son independientes del

campo cristalino (D_2). Por otro lado, la curva 10 (b) muestra que para $h = -1$ la temperatura crítica (T_C) en promedio, como lo muestra la línea punteada de color rojo, crece con el aumento del campo de anisotropía (D_2). Los puntos críticos, en la figura 10, se reflejan en cada una de las gráficas de las magnetizaciones y las susceptibilidades magnéticas.

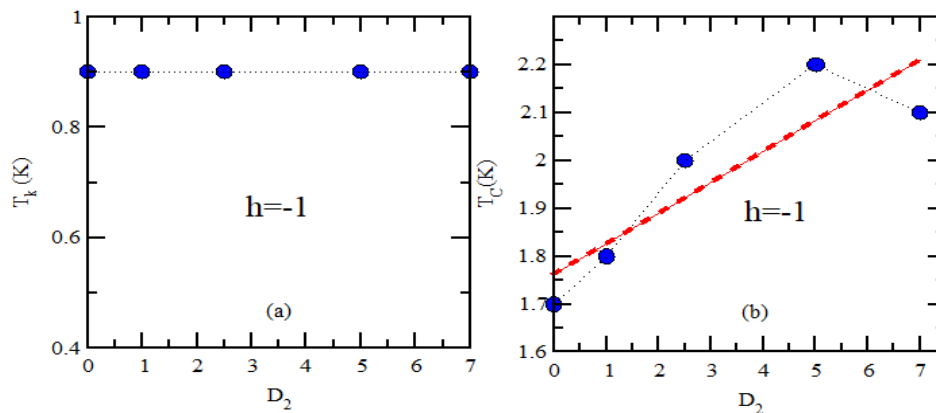


Figura 10: Dependencia de las temperaturas crítica (T_C) y no críticas (T_k) del sistema para distintos valores del campo cristalino D_2 , con valores fijos $J_1 = -1$, $D_1 = -2.5$ y $h = -1$.

MODELO J_1 - J_3 - D_1 - D_2 : Efectos del Campo Cristalino D_1 . Ahora se consideran los parámetros del Hamiltoniano con los valores $J_1 = -1$, $J_3 = 2.5$, $h=0$ y $D_2 = 2$, cuando el campo de anisotropía iónica D_1 varía.

En la figura 11 se observa la influencia del campo cristalino D_1 sobre la magnetización total del ferrimagneto tipo Ising de espines $S = 1$ y $\sigma = 2$. Para los valores $-1.2 \leq D_1 \leq 0$ (Figura: 11 a-d). La

magnetización decrece desde su estado base en $T = 0$ ($M_T(0) = 0.5$), donde la magnetización es máxima, lo que indica un orden de los momentos magnéticos, implicando que el sistema posea magnetización espontánea hasta llegar a cero a medida que aumenta la temperatura y el sistema se desordena totalmente. Aquí el sistema pasa de una fase ferrimagnética a una paramagnética.

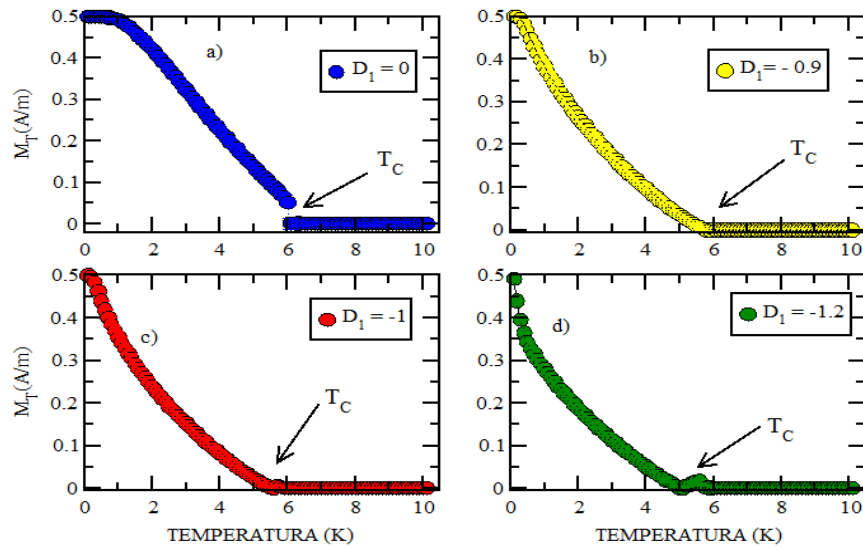


Figura 11: Comportamiento de la magnetización total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $J_3 = 2.5$, $D_2 = 2$ y D_1 varía. En el diagrama, los puntos de transición de fase se simbolizan con T_C .

Se puede decir que, a medida que D_1 aumenta en valor absoluto ($-1.2 \leq D_1 \leq 0$) el sistema es más propenso a desordenarse con el aumento de la temperatura. Por otro lado, cuando consideramos el rango de los valores $-2.5 \leq D_1 \leq -1.5$ para el campo de anisotropía D_1 asociado a la red de espines S , en la figura 12, se puede apreciar un incremento desde $M_T = 0$ en el estado base, hasta alcanzar un pico y luego M_T comienza a

decrecer con el aumento de la temperatura llegando nuevamente a $M_T = 0$, posteriormente la magnetización total empieza a crecer desde cero hasta alcanzar un nuevo pico, para finalmente experimentar una transición de fase de segundo orden (continua) a una temperatura T_C . Podemos decir que el sistema experimenta dos transiciones de fase sucesivas.

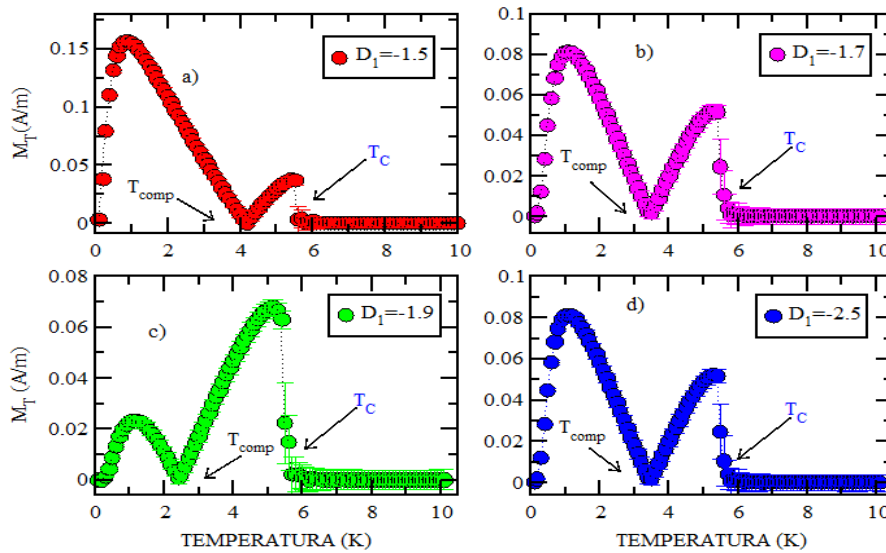


Figura 12: Comportamiento de la magnetización total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $J_3 = 2.5$, $D_2 = 2$ y D_1 varía. Los puntos de compensación y de Curie se indican como T_{comp} y T_C .

El hecho de que en $T=0$ la magnetización total valga cero, sugiere que $M_S = -M_\sigma$, lo que indicaría una interacción antiferromagnética en $T=0$ para los valores de D_1 indicados anteriormente. Al aumentar la temperatura, el sistema pasa de esta fase antiferromagnética a una ferrimagnética, como lo indica la figura 12, al seguir aumentando la temperatura el sistema cae nuevamente en la fase antiferromagnética, donde se presenta una temperatura de compensación (T_{comp}); para temperaturas aún más altas, el sistema pasa nuevamente a la fase ferrimagnética. Para finalmente experimentar una transición de fase de segundo orden que deja al sistema en una fase paramagnética en T_C . Vale la pena resaltar que para el rango de valores entre $-1.5 \leq D_1 \leq -2.5$, el sistema experimenta un fenómeno interesante denominado de compensación, este fenómeno ocurre en el valor $T = T_{comp}$, como lo podemos percibir en el gráfico 12, la cual se localiza en el punto de corte de la magnetización total con el eje de la temperatura. Esta ocurre debido a la cancelación de las magnetizaciones de las subredes, ya que existen diferentes dependencias de las magnetizaciones de las subredes con la temperatura. La temperatura de compensación es de suma importancia en el estudio de los sistemas magnéticos ya que tiene muchas aplicaciones prácticas, entre estas resaltamos los procesos de escritura y borrado en las grabaciones magneto-ópticas, esto es

debido al incremento de la coercitividad en el material en T_{comp} , lo cual facilita estos procesos (De La Espriella et al., 2011; Hurtado, 2004).

Ahora estudiamos las fluctuaciones de la magnetización total del sistema para calcular la susceptibilidad magnética, χ_T . Podemos observar en las curvas de las figuras 13 y 14 el comportamiento de la susceptibilidad para distintos valores de D_1 . De dichos diagramas se advierte un incremento gradual de la susceptibilidad con la temperatura hasta alcanzar un máximo en el punto de transición $T = T_C$, para luego decrecer a valores distintos de cero para altas temperaturas. Es decir, cuando la temperatura se aproxima a la temperatura crítica, podemos ver un incremento rápido y positivo de la susceptibilidad hasta $T = T_C$. Por otro lado, en las figuras 13 y 14 también se pueden apreciar picos secundarios, denominados picos no críticos, los cuales se presentan a bajas temperaturas comparadas con T_C . Estos picos no críticos en $T = T_k$ son producto del reordenamiento térmico de los espines de las subredes. Las subredes no dependen de la misma forma de la temperatura y para ciertos valores de los campos de anisotropía puede que una se desordene más rápido que la otra con el incremento de la temperatura, originando uno de estos picos señalados en las gráficas (13 y 44) denotados como $T = T_k$.

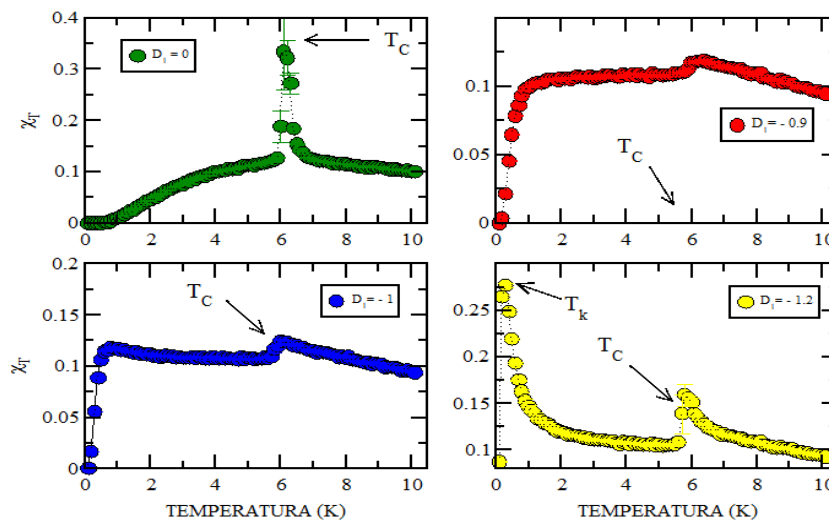


Figura 13: Comportamiento de la susceptibilidad total por espín, como una función de la temperatura, para valores fijos $J_1 = -1$, $J_3 = 2.5$, $D_2 = 2$ y D_1 varía. T_k representa temperaturas de picos no críticos y T_C es la temperatura de transición a la fase paramagnética.

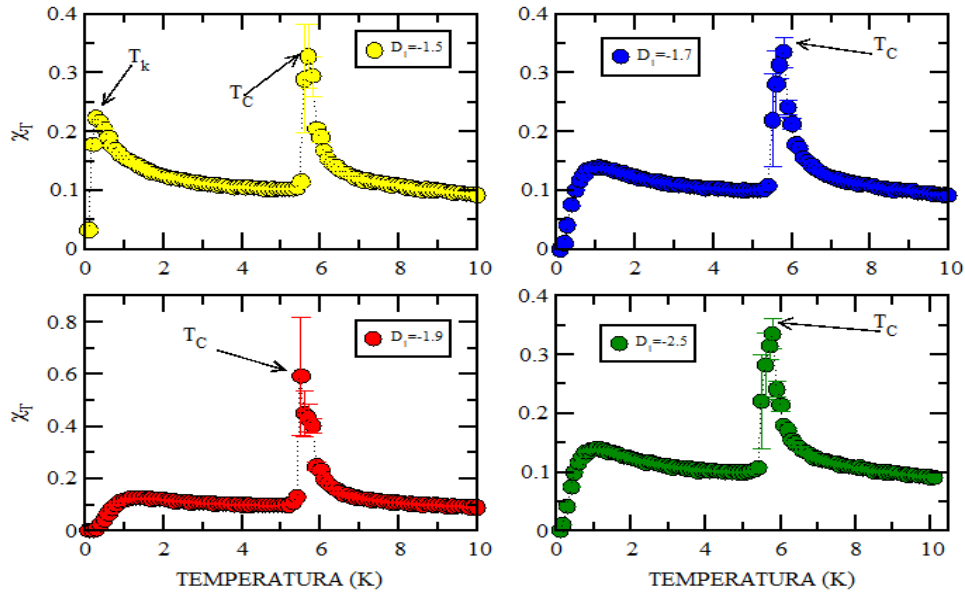


Figura 14: Comportamiento de la susceptibilidad total por espín como una función de la temperatura para valores fijos $J_1 = -1$, $J_3 = 2.5$, $D_2 = 2$ y D_1 varía. T_k representa temperaturas de picos no críticos y T_C es la temperatura de transición a la fase paramagnética.

La figura 15 (a) revela el comportamiento de la temperatura de transición para diversos valores de D_1 . Aquí se puede apreciar que T_C oscila entre los valores $5.5 \leq T_C \leq 6.1$ y decrece con el aumento del valor absoluto del campo cristalino (D_1), como lo muestra la línea punteada de color rojo en el diagrama 15 (a). Por otro lado, el diagrama 15 (b) muestra el comportamiento de la temperatura de compensación

que aparece para los valores del campo cristalino comprendidos entre $-1.5 \leq D_1 \leq -2.5$ (rango de valores considerados en el gráfico 12), es importante señalar que este fenómeno de compensación aparece para estos valores del campo cristalino ($-1.5 \leq D_1 \leq -2.5$) debido a la presencia de J_3 , que es cuando consideramos interacciones $\sigma_i \leftrightarrow \sigma_j$.

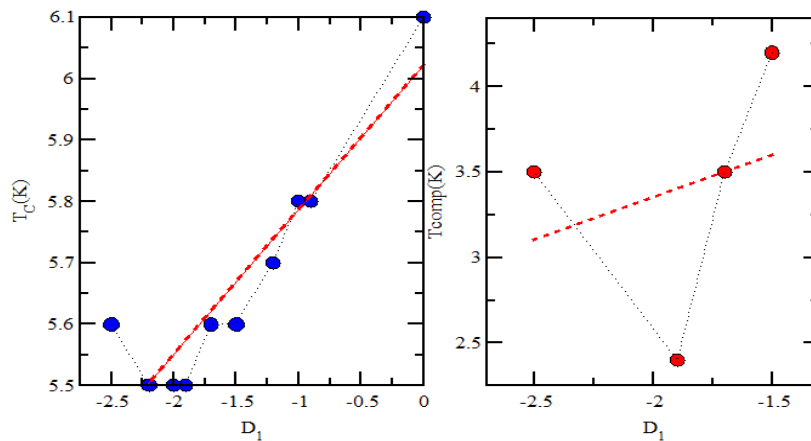


Figura 15: Temperaturas crítica y compensación de espín en función de la interacción D_1 , para valores fijos de $J_1 = -1$, $J_3 = 2.5$ y $D_2 = 2$.

DISCUSIÓN

Ahora discutiremos los fenómenos presentes en cada uno de los modelos estudiados con respecto al ferrimagneto tipo Ising de espines 1 y 2. Un estudio importante de este tipo de sistemas es el análisis de los estados base que presentan, para ciertos valores específicos de las interacciones del Hamiltoniano, dado que esto nos da una buena aproximación para estudiar los diagramas de fase a temperatura finita de las variables magnetización y susceptibilidad. De La Espriella et al., (2018a), calcularon los estados base del modelo J_1 - D_1 - D_2 demostrando que para valores grandes y negativos de la anisotropía D_1 la magnetización en el estado base es cero, tal como se demuestra en las figuras 1 y 2. El comportamiento magnético del sistema de espines 1 y 2 también fue analizado en una nanoestructura en forma de alambre hexagonal con simulaciones Monte Carlo. La magnetización y la susceptibilidad magnética presentan un comportamiento cualitativo similar al que se halló en este trabajo, con temperaturas críticas mayores (Masrour et al., 2015). Un fenómeno interesante hallado en este trabajo es el de las temperaturas de compensación (T_{comp}), importantes en las grabaciones magneto-ópticas y almacenamiento de datos, dado que en ese punto la coercitividad del material crece abruptamente y con un campo muy pequeño se puede invertir la dirección de la magnetización total. Al comparar con investigaciones previas sobre el sistema de espines 1 y 2, hallamos que cuando el sistema interactúa con campos magnéticos fijos se obtienen puntos de compensación de menor temperatura, como en el caso nuestro, no así cuando se consideran campos oscilantes o variables en el tiempo, se comprobó que la T_{comp} tiene mayor magnitud (Korkmaz and Temizer, 2012). En la referencia Deviren et al (2010), para el modelo en estudio en una red cuadrada, reportaron transiciones de fase de primer y segundo orden, así como también comportamientos tricrítico y reentrante. En nuestro caso solo hallamos transiciones de fase de primer y segundo orden mayores que las de Deviren et al (2010). El reordenamiento de espines a bajas temperaturas por efectos del campo externo, originó en el ferrimagneto picos no críticos en $T = T_k$, fenómeno

no reportado en la referencia Deviren et al (2010), el cual creemos que no se les presentó por considerar los campos cristalinos de las subredes con igual intensidad.

Por otro lado, Wei et al (2006), analizaron la configuración de espines 1 y 2 ferrimagnética con distintas anisotropías y encontraron transiciones continuas y discontinuas al igual que nosotros, aunque con diferentes valores, dado que usaron un método perturbativo tipo campo medio. Transiciones de primer orden y temperaturas de compensación fueron reportadas por De La Espriella et al (2018a) para este modelo bajo la acción de un campo externo longitudinal, al igual que en esta investigación, aunque en De La Espriella et al (2018a) tienen en cuenta un promedio de los campos cristalinos ($D_1=D_2=D$) el comportamiento cualitativo de la magnetización donde se exhiben los mencionados fenómenos es similar al nuestro. De acuerdo con lo expuesto, cabe resaltar que nuestra investigación refleja un comportamiento termomagnético del modelo acorde con investigaciones previas sobre el tema, podríamos en un futuro trabajo incluir campos variables en el tiempo y analizar comportamientos de histéresis para obtener otros fenómenos de interés aplicables posiblemente en dispositivos espintrónicos.

CONCLUSIONES

Las conclusiones detalladas a continuación demuestran el logro del objetivo, el cual es el análisis de la influencia termomagnética de los campos de anisotropía iónica y de un campo externo sobre un sistema ferrimagnético de espines $S = 1$ and $\sigma = 2$ alternados en una red cuadrada de 14.400 sitios, usando simulaciones Monte Carlo y un algoritmo tipo baño térmico con condiciones de borde periódicas.

Interacción: $J_1 - D_1 - D_2 - h$

- El sistema experimenta una transición de fase de segundo orden a una temperatura T_C , quedando en una fase paramagnética, aún para $h = 0$.
- T_C aumenta con el incremento del campo D_2 en $-1 \leq D_2 \leq 2$, mientras que en $2 < D_2 \leq 4$ T_C se mantiene constante.

- Para $h = 1$ el sistema experimenta una transición de primer orden en $T = T_t$.
- Para $h = -1$ la temperatura de primer orden T_t es removida por el campo magnético negativo y se observaron picos no críticos.
- Para $h = -1$, T_C aumenta con el incremento de D_2 .

Interacción: $J_1 - J_3 - D_1 - D_2$

- El sistema experimenta transiciones de fase continuas en el rango $-1.2 \leq D_1 \leq 0$.
- El sistema exhibe, T_{comp} en $-2.5 \leq D_1 \leq -1.5$ y se notan dos transiciones de fase sucesivas: antiferromagnética - ferrimagnética y ferrimagnética - paramagnética.
- Debido a los efectos de los campos de anisotropía y a la interacción de intercambio se observaron picos no críticos en las curvas de la susceptibilidad.

AGRADECIMIENTOS

Nicolás De La Espriella Vélez agradece al Dr. J. T. Messiah por los aportes y aclaraciones en este artículo, también a la Universidad de Córdoba por los medios computacionales suministrados.

REFERENCIAS

Albayrak, E. Yigit, A. (2005). The critical behavior of the mixed spin-1 and spin-2 Ising ferromagnetic system on the Bethe lattice. *Physica A* 349, 471-486. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2004.10.036>.

Barker, J. Atxitia, U. Ostler, T.A. Hovorka, O. Chubykalo-Fesenko, O. Chantrell, R.W. (2013). Two-magnon bound state causes ultrafast thermally induced magnetisation switching. *Scientific Reports*. 3, 3262. <https://doi.org/10.1038/srep03262>.

Deviren, B. Ertaş, M. Keskin, M. (2010). The effective-field theory studies of critical phenomena in a mixed spin-1 and spin-2 Ising model on honeycomb and square lattices, *Physica A* 389, 2036-2047. doi:10.1016/j.physa.2010.01.038.

De La Espriella, N. Arenas, A.J. Páez Meza M.S. (2016). Magnetic properties of an Ising ferromagnetic model on a square lattice with next-nearest-neighbor and crystal field interactions.

Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 417, 434-441. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.05.090>.

De La Espriella, N. Madera, J.C. Buendía, G.M. (2017). Critical phenomena in a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising ferroferrimagnetic system in a longitudinal magnetic field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 442, 350-359. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.07.015>.

De La Espriella, N. Buendía, G.M. Madera, J.C. (2018). Mixed spin-1 and spin-2 Ising model: study of the ground states, *Journal of Physics. Communications*. 2 025006. <https://doi.org/10.1088/2399-6528/aaa39b>.

De La Espriella, N. Madera, J.C. Sánchez-Caraballo, A. (2018). Reentrant and spin compensation phenomena in an Ising type ferrimagnetic system. *Physica A* 511, 289-301. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.07.053>.

De La Espriella, N. Madera, J.C. Burgos, R. (2019). Thermomagnetic Behavior of a Ferrimagnet of High Spins: Monte Carlo Analysis. *IEEE Transactions on Magnetics*, 55, 6000807. DOI:10.1109/TMAG.2019.2935045.

De La Espriella, N. Karimou, M. Buendía, G.M. (2021). Mixed Spin-(3/2,7/2) Ising-Type Ferrimagnet: Monte Carlo-Mean Field Treatment. *Physica Status Solidi B*. 2000536, 1-14. <https://doi.org/10.1002/pssb.202000536>.

De La Espriella, N. Casiano, G. Ortega, C. (2012). Propiedades magnéticas del sistema ferrimagnético de Ising mixto de espines $S = 3/2$ y $\sigma = 5/2$. *Información Tecnológica*. 23, 129-140. doi: 10.4067/S0718-07642012000200015.

De La Espriella, N.A. Casiano, G.R. Ortega, C. (2011). Estudio Monte Carlo de un Ferrimagneto de Ising Mixto con Diferentes Anisotropías. *Información Tecnológica*. 23, 117-128. doi: 10.4067/S0718-07642012000200014.

Getzlaff, M. (2008), *Fundamentals of Magnetism*, Springer.

Hurtado, N. (2004). Modelo de multicapas $Gd_{1-x}Co_x/Co$ y la dependencia de su comportamiento con la variación del espesor de la capa ferromagnética $Gd_{1-x}Co_x$. *Revista Mexicana de Física*. 52, 158-160.

Htoutou, K. Ainane, A. Saber, M. (2004). The transverse crystal-field effects of the mixed spin Ising bilayer system. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 269, 245-258. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2003.07.002>.

Kageyama, H. Khomskii, D.I. Levitin, R.Z. Vasil'ev, A.N. (2003). Weak ferrimagnetism, compensation point, and magnetization reversal in $Ni(HCOO)_2 \cdot 2H_2O$. *Physical Review B, Condensed Matter*. 67, 224422. [http://dx.doi.org/10.1016/S0921-4526\(02\)02140-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0921-4526(02)02140-3).

Karimou, M. Bati, M. (2021). Magnetic properties of spin-7/2 Blume-Capel chain under a magnetic field. *Solid State Communications*. 324, 114137.

Keskin, M. Ertaş, M. Canko, O. (2009). Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams in the kinetic mixed spin-1 and spin-2 Ising system in an oscillating magnetic field. *Physica Scripta*. 79, 025501. <https://doi.org/10.1088/0031-8949/79/02/025501>.

Korkmaz, T. Temizer, U. (2012). Dynamic compensation temperature in the mixed spin-1 and spin-2 Ising model in an oscillating field on alternate layers of a hexagonal lattice, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 324, 3876-3886. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.06.039>.

Magoussi, H. Zaim, A. Kerouad, M. (2013). Theoretical investigations of the phase diagrams and the magnetic properties of a random field spin-1 Ising nanotube with core/shell morphology. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 344, 109-115. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.05.044>.

Masrour, R. Jabar, A. Benyoussef, A. Hamedoun, M. Bahmad, L. (2015). Hysteresis and compensation behaviors of mixed spin-2 and spin-1 hexagonal Ising nanowire core-shell structure. *Physica B*: 472, 19-24. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2015.05.010>.

Newman, M.E.J. Barkema, G.T. (2006). *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press.

Ostler, T. A. *et al.* (2012). Ultrafast heating as a sufficient stimulus for magnetization reversal in a ferrimagnet. *Nature Communications*. 3, 666. doi: 10.1038/ncomms1666.

Temizer, U. Yazar, S. Tulek, M. (2016). The dynamic critical properties of the spin-2 Ising model on a bilayer square lattice. *Physica A*. 450, 369-384. [10.1016/j.physa.2016.01.024](https://doi.org/10.1016/j.physa.2016.01.024).

Wei, G. Gu, Y. Liu, J. (2006). Mean-field and Monte Carlo studies of a mixed spin-1 and spin-2 Ising system with different anisotropies. *Physical Review B* 74, 024422. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.024422>.

Zhang, Q. Wei, G. Xin, Z. Liang, Y. (2004). Effective-field theory and Monte Carlo study of a layered mixed spin-1 and spin-2 Ising system on honeycomb lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 280, 14-22. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.02.033>.

Žukovič, M. Bobák, A. (2016). Critical behavior of a triangular lattice Ising AF/FM bilayer. *Physics Letters*. 380, 1087-1092. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.01.016>.