Propiedades Magnéticas del Sistema Ferrimagnético de Ising Mixto de Espines $S=3/2$ y $\sigma=5/2$

Nicolás A. De La Espriella, Gladys R. Casiano, César Ortega

Universidad de Córdoba. Departamento de Física y Electrónica. Grupo Gamasco. Facultad de Ciencias Básicas. Carrera 6 No. 76-103. Córdoba, Colombia. (e-mail: ndelae52@gmail.com)

Recibido Sep. 09, 2011; Aceptado Nov. 08, 2011; Versión Final recibida Ene. 04, 2011

Resumen

Se estudian las propiedades magnéticas de un sistema ferrimagnético de Ising, con espines mixtos $S = \pm 3/2, \pm 1/2$ y $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$. Los espines están alternados sobre una red cuadrada, tal que las interacciones a primeros vecinos se dan entre espines distintos ($S \leftrightarrow \sigma$) y las interacciones a segundos vecinos entre espines del mismo tipo ($\sigma_k \leftrightarrow \sigma_l$). Cuando el Hamiltoniano incluye acoplamientos antiferromagnéticos entre espines S y σ , ferromagnéticos y antiferromagnéticos entre espines σ y campo cristalino D , se encuentra que la temperatura crítica depende fuertemente de los valores de los parámetros establecidos en el Hamiltoniano. Se analiza también el comportamiento a temperatura finita de la magnetización total de la red, de las magnetizaciones de las subredes y de la susceptibilidad magnética total, teniendo en cuenta los efectos del acoplamiento de intercambio entre segundos vecinos y del campo cristalino. Para el Hamiltoniano estudiado, no se encuentran puntos de compensación.

Palabras clave: sistema Ising, Monte Carlo, temperaturas críticas, magnetizaciones, campo cristalino

Magnetic Properties of mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising Ferrimagnetic System

Abstract

The magnetic properties of ferrimagnetic Ising system with mixed spins $S = \pm 3/2, \pm 1/2$ y $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ are studied. The spins are alternated on a square lattice, such that nearest-neighbor interactions occur between different spins ($S \leftrightarrow \sigma$), and interactions next nearest-neighbor between spins of the same type ($\sigma_k \leftrightarrow \sigma_l$). When the Hamiltonian includes couplings antiferromagnetic between spins S and σ , ferromagnetic and antiferromagnetic between spins σ and D crystal field, it was found that the critical temperature strongly depends on the values of the parameters of the Hamiltonian. The behavior at finite temperature of the total magnetization of the lattice, the magnetization of the sublattices and the total magnetic susceptibility are also studied, taking into account the effects of exchange coupling between next nearest-neighbor and the crystal field of the lattice. For the Hamiltonian studied, there are not compensation points..

Keywords: Ising system, Monte Carlo, critical temperatures, magnetizations, crystal field

INTRODUCCIÓN

La demanda tecnológica de los años recientes ha impulsado investigaciones dirigidas hacia la búsqueda continua de materiales magnéticos, y ha conducido a la síntesis de una gran cantidad de nuevos compuestos moleculares con novedosas propiedades, entre las que se destacan ordenamiento ferrimagnético (Ohkoshi y Hashimoto, 2002; Albayrak y Yilmaz, 2008; Blundell y Pratt, 2004; Gatteschi y Sessoli, 2004), solubilidad en solventes orgánicos, presencia de momentos magnéticos gigantes con el dopado de algunos materiales (Subhabrata et al., 2005) y transparencia en el rango visible de las ondas electromagnéticas, lo que permite el almacenamiento magneto-óptico de información. Este tipo de almacenamiento, se usa en la fabricación de discos duros, que se construyen con materiales consistentes de antiferromagnetos acoplados a películas delgadas de ferromagnetos, con el fin de superar el límite paramagnético. Dentro de los materiales magnéticos se hallan los ferrimagnetos moleculares, cuyos principales temas de investigación están agrupados en dos grandes aspectos: uno es la obtención de magnetos con una alta temperatura crítica, y el otro es el diseño de magnetos con funcionalidades novedosas. Como un prototipo de los sistemas que tienen estas propiedades, los análogos al azul de Prusia son atractivos, ya que son excelentes ejemplos de materiales ferrimagnéticos con estructuras cristalinas regulares, espacio relativamente grande entre los iones magnéticos, y se pueden ensamblar de un modo alternante (Ohkoshi y Hashimoto, 2002; Buendía y Villarroel, 2007). El campo del magnetismo molecular ha abierto grandes expectativas para generar materiales magnéticos, ya que un pequeño cambio controlado durante el proceso de síntesis, tal como la sustitución de un metal por otro, hace que surjan nuevas propiedades magnéticas (Bobak et al., 2003a ; Coronado y Gatteschi, 2006).

Los modelos de Ising mixtos, a pesar de su relativa simplicidad, son un excelente medio para estudiar muchas propiedades termomagnéticas de los complejos materiales ferrimagnéticos (Behera et al., 2009; Ekiz, 2008; Yessoufou et al., 2009), por lo que pueden exhibir diversos fenómenos críticos (Deviren et al., 2009a; Keskin y Polat, 2009; Bobak et al., 2003b), entre los que se destacan ordenamiento magnético a temperatura ambiente, momentos magnéticos espontáneos, transiciones magnetoelásticas (Yessoufou et al., 2009; Deviren y Keskin, 2010), y la aparición de temperaturas de compensación en un cierto rango de concentración de los componentes (Buendía y Villarroel, 2007; Figueiredo et al., 2004). Esta última propiedad, asociada con el incremento de la coercitividad (Buendía y Machado, 2000), permite la formación de pequeños dominios magnéticos estables, situación que se puede aplicar en la escritura y borrado de memorias magneto-ópticas de alta densidad (Hurtado y Buendía, 2003).

Una clase particularmente interesante de sistemas de Ising mixtos, son los que tienen espines de valor relativamente alto y semientero, tal como el de espines ($S=3/2, \sigma=5/2$) que estudiamos en este trabajo, los cuales se han analizado menos que los de espines de valores bajos (Albayrak e Yigit, 2007; Deviren y Keskin, 2010), y en la mayoría de los casos los estudios se han realizado con aproximaciones tipo campo medio y métodos perturbativos. Estos métodos, en algunos casos, han sido cuestionados por descartar todas las interacciones entre los espines (Deviren et al., 2009b).

Las propiedades magnéticas de los sistemas de espines altos dependen fuertemente del campo cristalino, dado que éste ejerce una gran influencia sobre el magnetismo molecular del sistema (De La Espriella y Buendía, 2011; Yessoufou et al., 2009; Zukovic y Bobak, 2010), dando lugar a interesantes efectos como fenómenos tricríticos (Strecka, 2006; Ekiz, 2005), cambios del carácter de la transición de fase, desde un segundo orden a un primer orden (Albayrak e Yigit, 2007) y fenómenos reentrantes y doblemente reentrantes (Kaneyoshi, 2000; Zhang et al., 2005; Zaim, 2009).

Además de la importancia del modelo de espines ($S=3/2, \sigma=5/2$) con respecto al estudio y caracterización de magnetos moleculares (Zhang et al., 2005), es interesante resaltar que este sistema parece ser pertinente para la caracterización de ciertos compuestos biológicos. Diversos experimentos muestran que, una mezcla de espines ($3/2, 5/2$) es responsable de las propiedades magnéticas de cierto tipo de proteínas de la sangre conocidas como ferricitocromos c' , las cuales se han etiquetado como modelos biológicos para dicha mezcla (Weiss et al., 2006). Estudios

basados en resonancia magnética nuclear muestran que la azida compleja porfírica de hierro (III), $[\text{Fe}(\text{TP}, \text{Pc})\text{N}_3]$, es un sistema de espines mixtos ($3/2, 5/2$), donde los dos estados están mecanocuánticamente mezclados a través del acoplamiento espín-órbita, y que el estado mixto tiene un nuevo estado base discreto (Neya et al., 2007). También, las porfirinas complejas de hierro (III) con espines mixtos ($3/2, 5/2$) han mostrado interesante actividad catalítica (Sánchez et al., 2003). Cabe destacar, que los sistemas de espines mixtos se han usado para explicar los resultados experimentales en óxidos amorfos ferrimagnéticos, en la cual los iones de Fe^{3+} están presentes (Htoutou et al., 2004).

Una de las técnicas más confiables y relativamente simple para analizar modelos de Ising mixtos es el método de Monte Carlo (Selke y Oitmaa, 2010; Godoy et al., 2004; Wei et al., 2006; De La Espriella y Buendía, 2011). Recientes estudios basados en métodos de Monte Carlo con análisis de escalamiento de tamaño finito, han mostrado nuevas características sobre el comportamiento de estos modelos (Zukovic y Bobak, 2010; Selke y Oitmaa, 2010). En este trabajo desarrollamos simulaciones numéricas, mediante el método de Monte Carlo, para investigar las propiedades magnéticas de un modelo de Ising mixto de espines ($S=3/2, \sigma=5/2$).

EL MODELO Y LA SIMULACIÓN NUMÉRICA

Se estudia un modelo ferrimagnético de Ising mixto, donde los espines $S = \pm 3/2, \pm 1/2$ y $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ están colocados en forma alternada sobre una red cuadrada de lado $L = 60$, con condiciones de borde periódicas. El Hamiltoniano que describe el modelo viene dado por

$$H = -J_1 \sum_{\langle nn \rangle} S_i \sigma_j - J_3 \sum_{\langle nnn \rangle} \sigma_j \sigma_k - D \sum_i S_i^2 - D \sum_j \sigma_j^2 \quad (1)$$

J_1 representa la interacción de intercambio a primeros vecinos ($\langle nn \rangle$), J_3 la interacción de intercambio entre los espines tipo σ , segundos vecinos en la red ($\langle nnn \rangle$), y D es el campo cristalino, responsable de la anisotropía del sistema. Todos los parámetros están en unidades de energía. Seleccionamos $J_1 < 0$ ($J_1 = -1$) puesto que el acoplamiento entre primeros vecinos es antiferromagnético, e incluimos acoplamientos ferromagnéticos ($J_3 > 0$) y antiferromagnéticos ($J_3 < 0$), a segundos vecinos de los espines tipo σ .

Nuestro estudio comienza calculando, en forma exacta, los diagramas de fase de estado base, en el plano ($D/|J_1|, J_3/|J_1|$). Estos diagramas de estados base son una herramienta importante para la comprensión del comportamiento de los diagramas de fase, a temperatura finita, del modelo. También son útiles para chequear la confiabilidad de los resultados numéricos y teóricos en el límite $T \rightarrow 0$, y para identificar las regiones en las cuales el modelo pudiera presentar un interesante comportamiento magnético, cerca de los puntos de coexistencia (Wei et al, 2006; De La Espriella y Buendía, 2010; Deviren et al., 2009b). En la figura 1 se muestra el diagrama de estado base de nuestro modelo, el cual es invariante bajo una inversión global de los espines y tiene 11 regiones bien definidas. El estado base del Hamiltoniano es traslacionalmente invariante, y de acuerdo a la conjetura de Luttinger y Tisza (Karl, 1973), es suficiente una celda 2×2 para incluir todos los posibles estados a $T \rightarrow 0 \text{ K}$. En el diagrama, se presentan nueve puntos multicríticos, donde coexiste más de una fase. Las líneas multifases o de coexistencia, que separan las configuraciones, se obtienen al igualar las ecuaciones de las energías de los estados base de cada región.

La celda 2×2 que forma las configuraciones de estados base tiene la forma $\begin{vmatrix} S & \sigma \\ \sigma & S \end{vmatrix}$, y sus energías, para $J_1 < 0$, se muestran en la tabla 1. Como cada celda unitaria tiene dos espines tipo S y dos del tipo σ , se pueden construir 576 ($4^2 \times 6^2 = 576$) configuraciones distintas, muchas de las cuales tienen el mismo valor de energía, indicando que existen estados degenerados. En la tabla 1 hemos omitido los ocho estados base degenerados existentes para $J_1 > 0$, puesto que no son de interés para nuestro estudio, porque sólo consideramos acoplamientos antiferromagnéticos a primeros vecinos. Hallamos las energías de las 576 configuraciones, pero por problemas de espacio no las publicamos aquí. La magnetización total por espín de los estados base, en la tabla 1, se obtiene

hallando la cuarta parte de la suma de los valores de los espines, mientras que las energías se hallan numéricamente.

Fig. 1: Diagrama de fase a $T = 0K$ para el modelo $J_1 - J_3 - D$.

Tabla 1: Energías de estados base del modelo $J_1 - J_3 - D$.

Región	Estado base	Energía
1	$\mp 3/2 \quad \pm 5/2$ $\pm 5/2 \quad \mp 3/2$	$-30J_1 - 25J_3 - 17D$
2	$\mp 3/2 \quad \pm 3/2$ $\pm 5/2 \quad \mp 3/2$	$-24J_1 - 15J_3 - 13D$
3	$\mp 3/2 \quad \pm 5/2$ $\pm 1/2 \quad \mp 3/2$	$-18J_1 - 5J_3 - 11D$
4	$\mp 3/2 \quad \mp 1/2$ $\pm 5/2 \quad \mp 3/2$	$-12J_1 + 5J_3 - 11D$
5	$\mp 3/2 \quad \pm 3/2$ $\pm 3/2 \quad \mp 3/2$	$-18J_1 - 9J_3 - 9D$
6	$\mp 3/2 \quad \pm 1/2$ $\pm 3/2 \quad \mp 3/2$	$-12J_1 - 3J_3 - 7D$
7	$\mp 1/2 \quad \pm 1/2$ $\pm 1/2 \quad \mp 1/2$	$-2J_1 - J_3 - D$
8	$\mp 1/2 \quad \mp 3/2$ $\pm 5/2 \quad \mp 1/2$	$-2J_1 + 15J_3 - 9D$
9	$\mp 1/2 \quad \mp 1/2$ $\pm 1/2 \quad \mp 1/2$	$J_3 - D$
10	$\mp 1/2 \quad \mp 5/2$ $\pm 5/2 \quad \mp 1/2$	$25J_3 - 13D$
11	$\mp 3/2 \quad \mp 5/2$ $\pm 5/2 \quad \mp 3/2$	$25J_3 - 17D$

En la tabla 2 presentamos las ecuaciones de las rectas de coexistencia entre las fases, y los rangos de validez de J'_3 y D' . Por ejemplo, la recta $J'_3 = -0.6$ separa las fases 1 y 11.

Para simular el modelo se aplica 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, θ , tal que $0 < \theta < \Sigma P_i$. El símbolo ΣP_i , representa la suma de las probabilidades de transición. Al elegir el espín al azar, el resto del sistema se comporta como un baño térmico (Newman y Barkema, 2006).

Tabla 2: Líneas de coexistencia y rangos de validez para el modelo $J_1 - J_3 - D$.

Fases	Rectas de coexistencia	Rango de D'	Rango de J'_3
1 – 2	$J'_3 = -(2/5)D' - 3/5$	$-(3/2) \leq D' \leq 0$	$-(3/5) \leq J'_3 \leq 0$
1 – 5	$J'_3 = -(1/2)D' - 3/4$	$-(5/2) \leq D' \leq -3/2$	$0 \leq J'_3 \leq 1/2$
1 – 7	$J'_3 = -(2/3)D' - 7/6$	$D' \leq -5/2$	$J'_3 \geq 1/2$
1 – 11	$J'_3 = -3/5$	$D' \geq 0$	$J'_3 = -3/5$
2 – 3	$J'_3 = -(1/5)D' - 3/5$	$-(6/7) \leq D' \leq 0$	$-(3/5) \leq J'_3 \leq -3/7$
2 – 5	$J'_3 = -(2/3)D' - 1$	$-(3/2) \leq D' \leq -6/7$	$-(3/7) \leq J'_3 \leq 0$
3 – 4	$J'_3 = -3/5$	$-(6/5) \leq D' \leq 0$	$J'_3 = -3/5$
3 – 5	$J'_3 = (1/2)D'$	$-(6/5) \leq D' \leq -6/7$	$-(3/5) \leq J'_3 \leq -3/7$
4 – 6	$J'_3 = (1/2)D'$	$-(10/7) \leq D' \leq -6/5$	$-(5/7) \leq J'_3 \leq -3/5$
4 – 8	$J'_3 = -(1/5)D' - 1$	$-(10/7) \leq D' \leq -4/3$	$J'_3 = -3/5$
4 – 10	$J'_3 = (1/10)D' - 3/5$	$-(4/3) \leq D' \leq 0$	$J'_3 = -3/5$
5 – 6	$J'_3 = -(1/3)D' - 1$	$-(3/2) \leq D' \leq -6/5$	$-(3/5) \leq J'_3 \leq -1/2$
5 – 7	$J'_3 = -D' - 2$	$-(5/2) \leq D' \leq -3/2$	$-(1/2) \leq J'_3 \leq 1/2$
6 – 7	$J'_3 = -3D' - 5$	$-(3/2) \leq D' \leq -10/7$	$-(5/7) \leq J'_3 \leq -1/2$
7 – 8	$J'_3 = (1/2)D'$	$-2 \leq D' \leq -10/7$	$-1 \leq J'_3 \leq -5/7$
7 – 9	$J'_3 = -1$	$D' \leq -2$	$J'_3 = -1$
8 – 10	$J'_3 = (2/5)D' - 1/5$	$-2 \leq D' \leq -4/3$	$-1 \leq J'_3 \leq -11/15$
9 – 10	$J'_3 = (1/2)D'$	$D' \leq -2$	$J'_3 \leq -1$
10 – 11	$D' = 0$	$D' = 0$	$J'_3 \leq 0$

Los datos se generan con 50000 pasos de Monte Carlo por sitio, usando diferentes números aleatorios, después de descartar los primeros 5000 pasos, que fueron suficientes para alcanzar el equilibrio térmico del sistema. Las barras de error se estiman usando el método de bloques. En este caso los errores se pueden calcular dividiendo la muestra de "longitud" L en N bloques de longitud $L_B = L/N$; si L_B es mayor que la longitud de correlación, los promedios de los bloques pueden considerarse estadísticamente independientes. De esta manera, los errores se calculan tomando los promedios de los bloques (10 en nuestro caso), en vez de las mediciones originales. Cabe destacar que este promedio es el mismo que se obtendría para las medidas originales, no obstante, la desviación estándar es distinta (Newman y Barkema, 2006). Es de notar que, aunque cada corrida del programa se empieza con una semilla distinta, en este algoritmo, el error no está asociado con la semilla de los números aleatorios, sino que depende de las configuraciones estadísticamente independientes que se generen.

El programa calcula las magnetizaciones de las subredes por sitio (M_s , M_σ) y la magnetización total por espín, M_T :

$$M_s = \frac{2}{L^2} \langle \sum_i S_i \rangle, \quad M_\sigma = \frac{2}{L^2} \langle \sum_j \sigma_j \rangle, \quad M_T = \frac{M_s + M_\sigma}{2} \quad (2)$$

Así como la susceptibilidad magnética total por espín χ_T , con $\beta=1/K_B T$:

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

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Analizamos el efecto de $D' = D/|J_1|$ y $J'_3 = J_3/|J_1|$ sobre el comportamiento de las magnetizaciones y la susceptibilidad magnética del sistema. En todos los cálculos $J_1 < 0$ ($J_1 = -1$). Los valores seleccionados para los parámetros J'_3 y D' , se hallan entre los permitidos en sus respectivos rangos de validez (ver tabla 2). Primero se fija el valor de J'_3 y se varía D' , y luego se hace el caso inverso.

Efectos del campo cristalino D

Las figuras 2(a)-(b) muestran el comportamiento de $|M_T(T)|$ para $J'_3 = 1$, y en las gráficas 2(c)-(d) se exhibe $|M_T(T)|$ para $J'_3 = 3$, cuando el campo D' varía. En la figura 2(a), para $J'_3 = 1$ y $D' < 0$, el Hamiltoniano del sistema favorece que los espines S tomen valores $\mp 1/2$, y los espines $\sigma = \pm 1/2$, como se nota en la región 7 de la figura 1 y en la tabla 1. En este caso, el sistema se comporta como un modelo de Ising de espines $\pm 1/2$, y $|M_T(T)| = 0$ en el intervalo $T \geq 1K$. Para $D' > -4$, al incrementarse $|D'|$, la T_C decrece. Para $J'_3 = 1$ y $D' > 0$, en la figura 2(b), la magnetización total crece desde su valor en $T = 0K$, hasta alcanzar un máximo, y luego decrece hasta reducirse a cero cuando $T = T_C$, con el incremento de la temperatura. En esta gráfica se observa que el sistema posee magnetización espontánea, y exhibe una transición de fase continua en la T_C . Cuando $|D'|$ decrece, T_C decrece.

Fig. 2: Comportamiento de la magnetización total del sistema, $|M_T(T)|$, como una función de la temperatura, para valores fijos de J'_3 y D' variable. En (a) y (b), $J'_3 = 1$. En (c) y (d), $J'_3 = 3$.

En las figuras 2(c)-(d) se incrementa la intensidad de J'_3 ($J'_3 = 3$). A pesar que nuevamente $|M_T(T)|$ presenta transiciones de segundo orden, se observa que T_C es mayor, respecto al caso de las figuras 2(a)-(b). Para $D' = -4$ y $J'_3 = 3$, en la gráfica 2(c), la $|M_T(T)|$ se incrementa desde $T = 0K$, en contraste con la figura 2(a), donde $|M_T(T)| = 0$. Es decir, el incremento de J'_3 hace que exista una magnetización distinta de cero, dado que esta fase es ferrimagnética (región 1 de la figura 1). En las figuras 2(a)-(d) se comprueba que los valores de $|M_T(T)|$ a $T = 0K$, coinciden con los hallados en los estados base de la figura 1. Parecería ilógico que la interacción a segundos vecinos (J'_3)

tomara valores mayores que la interacción a primeros vecinos (J_1), pero esto no tiene nada de particular, puesto que las interacciones no dependen exclusivamente de la distancia. Además, los segundos vecinos, al ser átomos distintos de los primeros, pueden tener interacciones distintas.

En las figuras 3(a)-(d) se analiza el comportamiento de las magnetizaciones de las subredes, las cuales decrecen desde sus valores de saturación en $T = 0K$, con el incremento de la temperatura. Los módulos $|M_\sigma(T)|$ y $|M_S(T)|$ presentan dos valores de saturación, que concuerdan con los valores del diagrama de fase de estado base (figura 1). Para $D' \ll 0$, en la figura 3(a), se comprueba que $|M_S(T)| = |M_\sigma(T)|$, y las subredes S y σ se alinean antiparalelamente, conllevando a que el sistema se halle en una región antiferromagnética ($|M_T(T)| = 0$).

Para todos los casos de la figura 3, debido al efecto de J'_3 la subred σ permanece más ordenada (símbolos llenos), mostrando el comportamiento de un ferromagneto. Para ambas subredes se presentan transiciones de segundo orden, cuyas temperaturas se obtienen examinando la temperatura a la cual $|M_\sigma(T)|$ y $|M_S(T)|$ se van a cero. Además, se observa que el incremento de D' hace que T_C se incremente. De otro lado, al incrementar J'_3 , en las figuras 3(c)-(d), las T_C a las cuales ocurren las transiciones ferri-paramagnéticas, son mayores respecto a las observadas en las gráficas 3(a)-(b). Las curvas no se cortan, es decir, no se compensan, lo que evidencia que no existen temperaturas de compensación (T_{Comp}) para los valores seleccionados de los parámetros del Hamiltoniano.

Fig. 3: $|M_\sigma|$ (símbolos llenos) y $|M_S|$ (símbolos vacíos). Los valores de D' para $|M_S|$, son iguales a los de $|M_\sigma|$, para el símbolo correspondiente. En (a) y (b), $J'_3 = 1$. En (c) y (d), $J'_3 = 3$.

En las figuras 4(a)-(d), se observa el usual comportamiento de la susceptibilidad en el límite $T \rightarrow T_C$.

Fig. 4: Comportamiento de la susceptibilidad magnética del sistema, χ_T , como una función de la temperatura. En (a) y (b), $J'_3 = 1$. En (c) y (d), $J'_3 = 3$.

La susceptibilidad se incrementa positivamente hasta alcanzar su máximo en $T = T_C$, justo donde finaliza la fase ferrimagnética, y el sistema se desordena totalmente (fase paramagnética). En la gráfica 4(d), para $D' = 2$, la susceptibilidad exhibe una estructura de dos picos, con un máximo no

crítico después de $T_C \approx 28K$. Este máximo se debe a que, en $T \geq T_C$, los espines de la subred S forman grandes clusters de distintas orientaciones, produciéndose magnetización cero. Estos clusters se reducen notablemente cuando están próximos a la temperatura donde se produce el segundo máximo, debido al reordenamiento térmico de los espines S , determinado por el acoplamiento J_1 , ya que los espines σ se mantienen más ordenados por la acción de J'_3 (figs. 3(b) y 3(d), $D' = 2$).

En la figura 5, se resumen los resultados obtenidos sobre la dependencia de T_C con respecto a D' . En el rango de valores estudiados de los parámetros del Hamiltoniano, la temperatura crítica es constante para $D' < D'_{\min}(J'_3)$, y se incrementa cuando $D' > D'_{\min}(J'_3)$, hasta alcanzar un valor límite, el cual crece con J'_3 . Los puntos críticos, en la figura 5, se reflejan en cada una de las gráficas de las magnetizaciones y las susceptibilidades magnéticas.

Fig. 5: Temperatura crítica, T_C , como una función de D' .

Efectos de la interacción J'_3

En este caso, se fija $D' = \pm 1$ y se varía J'_3 . En la figura 6, se muestra $|M_T(T)|$ como una función de la temperatura, para diversos valores de J'_3 .

En la gráfica 6(a), se consideran acoplamientos antiferromagnéticos a segundos vecinos ($J'_3 < 0$). Para $D' = 1$ y $J'_3 = -0.1, -0.5$, el módulo $|M_T(T)|$ cae desde su valor de saturación (0.5) en $T = 0K$, hasta hacerse cero en $T = T_C$. La transición ferri-paramagnética se presenta más rápidamente para $J'_3 = -0.5$. Cuando $J_1 = J'_3 = -1$, el $|M_T(T)|$ es cero, y el sistema pasa del estado $\sigma = \pm 5/2$ al estado $\sigma = \mp 5/2$, esto es, se da una transición entre las fases 1 y 11 (ver tabla 1), y para valores grandes de D' , la subred S está formada sólo por espines $S = \mp 3/2$. En las figuras 6(b)-(c), para $J'_3 > 0$, la magnetización total, a $T = 0K$, es 0.5, y decrece a cero continuamente en $T = T_C$, con el incremento de la temperatura.

Fig. 6: Comportamiento de la magnetización total del sistema, $|M_T(T)|$, como una función de la temperatura, para valores fijos de D' y J'_3 variable. En (a) y (b), $D' = 1$. En (c), $D' = -1$.

En la figura 7, el comportamiento de las magnetizaciones de las subredes, $|M_S(T)|$ y $|M_\sigma(T)|$, indica que el sistema experimenta solamente transiciones de segundo orden, dado que las curvas se van a cero continuamente, cuando la temperatura se incrementa. En las figuras 7(b)-(c), se observa que las curvas de $|M_\sigma(T)|$ son de tipo Q, y típicas de un ferromagneto, debido a la influencia de J'_3 , que mantiene la subred σ más ordenada; mientras que la subred S se desordena más rápidamente, originando curvas tipo S en la clasificación de Néel, para el $|M_S(T)|$ (Deviren y Keskin, 2010). Los diversos valores de $|M_T(T)|$, $|M_S(T)|$ y $|M_\sigma(T)|$, en las figuras 6 y 7, nos indican que la configuración de espín, a $T = 0K$, en el sistema, es no colineal (Liang et al, 2008).

Fig. 7: $|M_\sigma|$ (símbolos llenos) y $|M_S|$ (símbolos vacíos). Los valores de J'_3 para $|M_S|$, son iguales a los de $|M_\sigma|$, para el símbolo correspondiente. En (a) y (b), $D' = 1$. En (c), $D' = -1$.

Las figuras 8(a)-(b), muestran el comportamiento de la susceptibilidad magnética, para $D' = 1$ y $D' = -1$, respectivamente. Los máximos de las curvas de $\chi_T(T)$, representan las T_C del sistema. En ambos casos, T_C se incrementa con el incremento de J'_3 . Además, existe una concordancia significativa de la T_C reflejada en las gráficas de $|M_T(T)|$, con la T_C considerada en los máximos de las curvas de la susceptibilidad magnética.

Fig. 8: Comportamiento de la susceptibilidad magnética del sistema, $\chi_T(T)$, como una función de la temperatura. En (a) $D' = 1$. En (b) $D' = -1$.

El comportamiento crítico del sistema como una función de J'_3 , se resume en la figura 9. Se observa una fuerte dependencia de T_C con relación a J'_3 . La T_C presenta un cambio abrupto en $J'_3 \approx -0.5$, donde parece tener un mínimo. Independientemente del valor del campo cristalino, la T_C se incrementa a medida que crece el $|J'_3|$.

Fig. 9: Temperatura crítica, T_c , como una función de J'_3 .

CONCLUSIONES

Se desarrolla un estudio numérico del comportamiento magnético de un modelo de Ising mixto ferrimagnético de espines $S = \pm 3/2, \pm 1/2$ y $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$, alternados en una red cuadrada, con interacciones a primeros y segundos vecinos, y campo cristalino. Se encuentra que existe una fuerte dependencia de la T_c del sistema con respecto a las interacciones en el Hamiltoniano, cuando consideramos acoplamiento antiferromagnético entre espines S y σ ($S \leftrightarrow \sigma$), ferromagnéticos y antiferromagnéticos entre espines σ ($\sigma \leftrightarrow \sigma$), y campo cristalino. Se calculan los diagramas de fase, a temperatura finita, de $|M_T(T)|$, $|M_S(T)|$ y $|M_\sigma(T)|$ y $\chi_T(T)$, mostrando las T_c para diversas combinaciones de los parámetros. Para $J'_3 > 0$ fijo, y $D' < 0$, al incrementar el $|D'|$, la T_c disminuye; mientras que para $D' > 0$, el incremento de $|D'|$, implica un incremento en la temperatura crítica. Para $D' > 0$ fijo y $J'_3 > 0$ variable, la T_c se incrementa con el incremento de J'_3 ; mientras que para $J'_3 < 0$, el incremento de $|J'_3|$ conlleva a una disminución ostensible de T_c . El estudio muestra que aun un pequeño cambio en los parámetros, modifica dramáticamente el comportamiento magnético del sistema.

REFERENCIAS

- Albayrak, E. y 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).
- Albayrak, E. y S. Yilmaz, Spin-1/2 and spin-1 Ising model with crystal field on a bilayer Bethe lattice, *Physica A*: 387, 1173-1184 (2008).
- Behera, J. N. y otros 3 autores, Synthesis and characterization of ruthenium and iron-ruthenium prussian blue analogues, *Chem. Mater.*: 21, 1922 (2009).
- Blundell, S. J. y F. L. Pratt, Organic and molecular magnets, *Journal of Physics: Condensed Matter*: 16, 771-828 (2004).
- Bobák, A., F. O. Abubrig y T. Balcerzak, Multicritical points in the mixed ferromagnetic-ferrimagnetic ternary alloy with a single-ion anisotropy, *Physical Review B*: 68 224405 (2003a).
- Bobák, A., T. Balcerzak y F.O. Abubrig, Ground-state Phase diagrams of the mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloy with a single-ion anisotropy, *Physica A*: 326, 151-158 (2003b).
- Buendía, G. y E. Machado, Magnetic Behavior of an Ising ferrimagnetic model in an oscillating field, *Physical Review B*: 61, 14686 (2000).
- Buendía, G. y J. Villarroel, Compensation temperatures of mixed ferro-ferrimagnetic ternary alloys, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*: 310, E495-E497 (2007).

- Coronado, E. y D. Gatteschi, Trends and challenges in molecule-based magnetic materials, *Journal of materials chemistry*: 16, 2513-2515 (2006).
- De La Espriella, N. y G. Buendía, Ground state phase diagrams for the mixed Ising $3/2$ and $5/2$ spin model, *Physica A*: 389, 2775-2732 (2010).
- De La Espriella, N. y G. Buendía, Magnetic behavior of a mixed Ising $3/2$ and $5/2$ spin model, *Journal of Physics: Condensed Matter*: 23, 176003 (2011).
- Deviren B., M. Keskin y O. Canko, Kinetic Ising model in a time-dependent oscillating external magnetic field: Effective-field theory, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*: 321, 458-466 (2009a).
- Deviren, B. y 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).
- Deviren, B., M. Keskin y 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).
- Ekiz, C., Tricritical behavior in the mixed spin- $1/2$ and spin-1 Ising ferromagnetic System on the two-fold Cayley tree, *Physica A*: 347, 353-362 (2005).
- Ekiz, C., Influence of anisotropic crystal field on a ferrimagnetic mixed spin bilayer system, *Physica A*: 387, 1185-1199 (2008).
- Figueiredo, W., M. Godoy y V. Leite, Compensation temperature of the mixed-spin Ising model on the hexagonal lattice, *Brazilian Journal of Physics*: 34, 392-394 (2004).
- Gatteschi, D. y R. Sessoli, Molecular nanomagnets: the first 10 years, *Journal of magnetism and magnetic materials*: 272-276, 1030-1036 (2004).
- Godoy, M., V. Souza y W. Figueiredo, Mixed-spin Ising model and compensation temperatura, *Physical Review B*: 69, 054428 (2004).
- Htoutou, K., A. Ainane y M. Saber, The tranverse cristal-field effects of the mixed spin Ising bilayer system, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*: 269, 245-248 (2004).
- Hurtado, N. y G. Buendía, Efecto del campo cristalino en un ferrimagneto mixto de Ising tridimensional, *Revista Mexicana de Física*: 49(3), 183-185 (2003).
- Keskin, M., e Y. Polat, Phase diagrams of a nonequilibrium mixed spin- $3/2$ and spin-2 Ising system in an oscillating magnetic field, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*: 321, 3905-3912 (2009).
- Kaneyoshi, T., Decoupling approximation in spin- S $S \geq 1/2$ Ising Systems, *Physica A*: 286, 518-530, (2000).
- Karl, G., Proof of a Conjecture by Luttinger and Tisza, *Physical Review B*: 7, 2050-2053 (1973).
- Ohkoshi, S. y K. Hashimoto, New Magnetic Functionalities Presented by Prussian Blue Analogues, *Electrochemical Society Interface*: 11, 34-38 (2002).
- Liang, Y. Q. y otros 3 autores, Magnetic properties of a mixed spin- $1/2$ and spin- $3/2$ tranverse Ising model in a longitudinal magnetic field, *Physica A*: 387, 4513-4518, (2008).
- Newman, M. E. J. y G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, 4ª edición, 68-70. Oxford University Press, New York, United States, (2006).

Neya, S. y otros 13 autores, Magnetic and Infrared Properties of the Azide Complex of (2,7,12,17-Tetrapropylporphycenato) iron(III): A Novel Admixing Mechanism of the $S = 5/2$ and $S = 3/2$ States, European Journal of Inorganic Chemistry: 20, 3188-3194 (2007).

Selke, W. y J. Oitmaa, Monte Carlo study of mixed-spin $S = (1/2, 1)$ Ising ferrimagnets, Journal of Physics: Condensed Matter: 22, 076004 (2010).

Sánchez, S. A. y otros 5 autores, New pinch-porphyrin complexes with quantum mixed spin ground state $S=3/2, 5/2$ of iron (III) and their catalytic activity as peroxidase, Biophysical Chemistry: 106, 253-265 (2003).

Strecka, J., Exacts results of a mixed spin-1/2 and spin-S Ising model on a bathroom tile (4-8) lattice: Effect of uniaxial single-ion anisotropy, Physica A: 360, 379-390 (2006).

Subhabrata, D. y otros cuatro autores, Colossal magnetic moment of Gd in GaN, Physical Review Letters: 94, 37205 (2005).

Wei, G., Q. Zhang y G. Yongwei, Monte Carlo studies of critical phenomena in mixed spin-1 and spin-3/2 Blume-Capel Ising model on simple cubic lattice, Journal of magnetism and magnetic materials: 301, 245 (2006).

Weiss, R., A. Gold y J. Turner, Cytochromes c' : Biological Models for the $S=3/2, 5/2$ Spin-State Admixture?, Chem. Rev.: 106 (6), 2550-2579 (2006).

Yessoufou, R. A., S. H. Amoussa y F. Hontinfinde, Magnetic properties of the mixed spin-5/2 and spin-3/2 Blume-Capel Ising system on the two-fold Cayley tree, Central European Journal of Physics: 7(3), 555-567 (2009).

Zaim, A., M. Kerouad e Y. Belmamoun, Monte Carlo study of a mixed spin-1/2 and spin-1 Blume-Capel ferrimagnetic model with four-spin interaction, Physica B: 404, 2280-2284 (2009).

Zhang, Q., G. Wei e 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, Physica status solidi b: 242 (4), 924-932 (2005).

Zukovic, M. y A. Bobak, Phase diagram of a mixed spin-1 and spin-3/2 Ising ferrimagnet, Physica A: 389, 5402-5407 (2010).