

Efecto del campo cristalino en un ferrimagneto mixto de Ising tridimensional

N. Hurtado

*Escuela de Física, Universidad Central de Venezuela,
Caracas, 1041A, Venezuela*

G.M. Buendía

*Departamento de Física, Universidad Simón Bolívar,
Caracas, 1080, Venezuela*

Recibido el 16 de enero de 2002; aceptado el 6 de agosto de 2002

Utilizando el método de Monte Carlo, hemos estudiado el efecto del término del campo cristalino sobre las temperaturas crítica y de compensación de un modelo ferrimagnético mixto de Ising, donde espines $\pm 1/2$ y espines $\pm 1, 0$ se colocan alternadamente en una red cúbica. Este modelo ha demostrado ser útil para el estudio del comportamiento magnético de materiales organometálicos que están siendo sintetizados en la actualidad. Nuestros resultados indican que ambas temperaturas dependen fuertemente del campo cristalino, existiendo un intervalo de valores del campo para el cual la temperatura de compensación desaparece. Esta dependencia puede tener aplicaciones tecnológicas interesantes, ya que puede ser usada para calibrar la temperatura de compensación y así mejorar las condiciones para el grabado termomagnético de información.

Descriptor: Ferrimagnetismo; Ising; temperaturas de compensación; Monte Carlo

We apply the Monte Carlo Method to study the effect of a crystal field, on the compensation and critical temperatures, of a three dimensional mixed Ising ferrimagnetic model, where spins $\pm 1/2$ are located in alternating sites with spins $\pm 1, 0$. This model has proven to be relevant to study the magnetic behavior of organometallic materials that are currently been synthesized. Our results indicate that both temperatures strongly depend on the crystal field. There is a range of values of the field where the compensation temperature disappears. This dependence might have interesting technological applications; it can be used to calibrate the compensation temperature and consequently improve the conditions for thermomagnetic recording.

Keywords: Monte Carlo; Ising; ferrimagnetic; compensation temperature.

PACS: 75.50.Gg; 75.10.Dg; 75.30.Gw

1. Introducción

La búsqueda continua de nuevos materiales magnéticos con propiedades tales como: transparencia óptica, baja densidad, biocompatibilidad, momentos magnéticos a bajas temperaturas, etc., ha conducido a la síntesis de una gran cantidad de nuevos compuestos, muchos de los cuales presentan ordenamiento ferrimagnético y temperaturas de compensación [1–3]. El interés en estos materiales se debe a sus múltiples aplicaciones tecnológicas y a la necesidad de entender sus propiedades para sintetizar nuevos y mejores materiales.

Los sistemas mixtos de Ising aunque sencillos han resultado un excelente modelo para estudiar diversos aspectos del ferrimagnetismo. Una de las características más interesantes de estos sistemas es que, para una temperatura inferior a la crítica T_{cr} , las magnetizaciones de las distintas subredes se cancelan, tal que la magnetización total del sistema es cero. Esta temperatura se conoce como temperatura de compensación, T_{comp} , difiere de la crítica en que a T_{cr} la magnetización total de la red se hace cero por que las magnetizaciones de las subredes se hacen cero. Se ha encontrado experimentalmente [4], que a la T_{comp} , el campo coercitivo del sistema aumenta, favoreciendo así la creación de dominios magnéticos pequeños y estables. Comportamiento que

tiene importantes aplicaciones prácticas, en particular en la escritura y reescritura de memorias magneto-ópticas de alta densidad, donde los cambios de temperatura se realizan calentando localmente la película magnética por medio de un rayo láser [5]. Este incremento de la coercitividad a la T_{comp} ha podido ser reproducido cualitativamente con un modelo mixto de Ising [6], similar al que va a ser estudiado en este trabajo.

Los modelos mixtos de Ising han sido estudiados por diversos métodos tales como campo medio [7] y campo efectivo [8]. Estudios basados en técnicas no-perturbativas como el método de Monte Carlo y el método de matriz de transferencia muestran que la existencia de puntos de compensación está asociada a la interacción entre los espines de tipo $\pm 1/2$, segundos vecinos en la red [9]. Trabajos preliminares en ferrimagnetos en dos dimensiones indican que la temperatura de compensación se ve afectada por la presencia de un campo cristalino [9,10]. En este trabajo hacemos un análisis más exhaustivo del efecto del campo cristalino en el comportamiento magnético de ferrimagnetos de Ising en tres dimensiones. Se calcula el diagrama de fases del modelo con interacciones a primeros y segundos vecinos, en función del campo cristalino. Estudiamos el comportamiento de la T_{comp} y la T_{cr} , encontrando que dependen fuertemente del campo cristalino.

Existe un intervalo de valores del campo para el cual existen puntos de compensación y otro para el que desaparecen.

2. Modelo y simulaciones

Estudiamos un modelo ferrimagnético mixto de Ising, donde espines $\sigma = \pm 1/2$ y $S = 0, \pm 1$ están colocados en forma alterna sobre una red cúbica de lado $L = 40$, con condiciones de borde periódicas. El hamiltoniano del modelo viene dado por

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle nn \rangle} \sigma_i S_j - J_2 \sum_{\langle nnn \rangle} \sigma_i \sigma_k - D \sum_j (S_j)^2, \quad (1)$$

donde J_1 representa la interacción de intercambio a primeros vecinos, J_2 la interacción de intercambio entre los espines σ , segundos vecinos en la red, y D es el campo cristalino, responsable de la anisotropía del sistema. Escogemos un acoplamiento ferrimagnético entre primeros vecinos, $J_1 < 0$. Todos estos parámetros están en unidades de energía. Trabajos previos muestran que este sistema presenta puntos de compensación [11]. Estudios recientes de una versión simplificada de este modelo, con $J_2 = 0$ y en dos dimensiones, indican que el comportamiento dinámico del sistema también tiene una fuerte dependencia con el valor del campo cristalino y sugieren la existencia de un punto tricrítico [12].

Utilizando el método de Monte Carlo, y haciendo un barrido secuencial de la red, se calcularon las magnetizaciones por sitio de la subred de espines S , M_S , y de la subred de espines σ , M_σ ; la magnetización total por sitio M y la susceptibilidad magnética χ . Se calcularon T_{cr} a partir de la susceptibilidad y T_{comp} a la cual las magnetizaciones de las subredes tienen igual magnitud $|M_S(T_{comp})| = |M_\sigma(T_{comp})|$ y signo opuesto, de tal forma que la magnetización total es cero a T_{comp} .

3. Resultados

Comenzamos estudiando el comportamiento del sistema en los casos de valores extremos del campo cristalino. Cuando $D \ll 0$ el hamiltoniano del modelo favorece que los espines S tomen el valor cero. En este caso el sistema se comporta como un modelo de Ising de espines $\pm 1/2$ con interacción a primeros vecinos J_2 . Este comportamiento se puede observar en la Fig. 1, cuando $D/|J_1| = -80$, $M_S = 0$ para todo el intervalo de temperaturas. En este límite la magnetización total del sistema es igual a la magnetización de la subred de espines σ y el sistema no presenta puntos de compensación.

En el límite $D \gg 0$ el valor de los espines S tiende a ± 1 y el sistema se comporta como un modelo de Ising de espines $1/2$ con interacción $2J_1$ a primeros vecinos y J_2 a segundos vecinos. Debido a la existencia de la interacción a segundos vecinos, en este límite el modelo presenta puntos de compensación, tal como se observa en la Fig. 2.

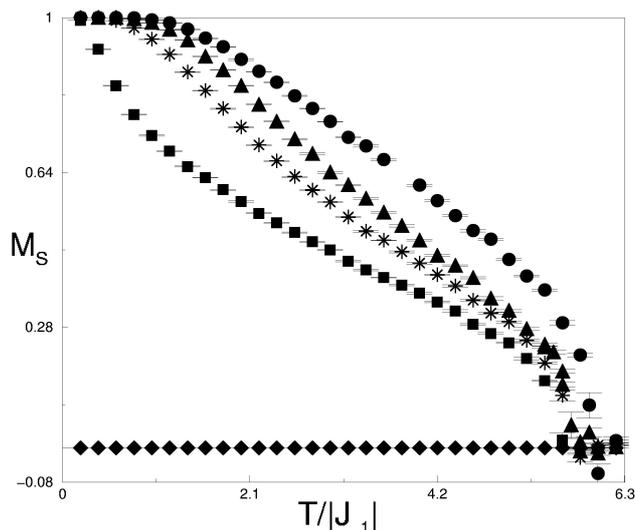


FIGURA 1. Magnetización de la subred M_S , en función de la temperatura, para $D/|J_1| = 80$ (círculos), $D/|J_1| = 2$ (triángulos), $D/|J_1| = 0$ (asteriscos), $D/|J_1| = -2$ (cuadrados) y $D/|J_1| = -80$ (rombos). En todos los casos $J_2/|J_1| = 2,0$

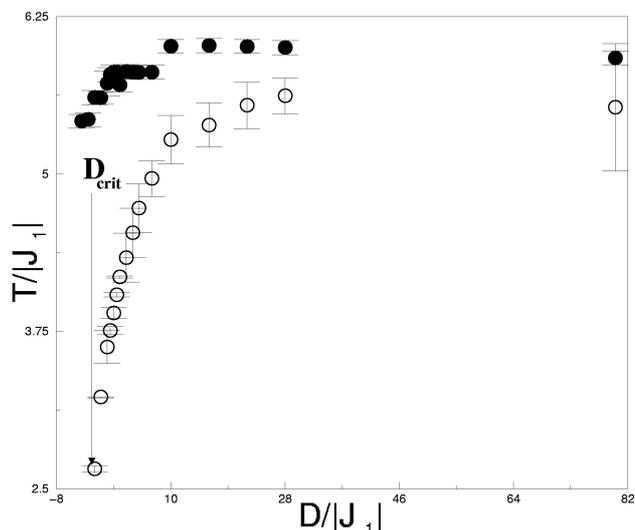


FIGURA 2. T_c (círculos llenos) y T_{comp} (círculos vacíos) en función de $D/|J_1|$, para $J_2/|J_1| = 2,0$.

En la Fig. 1 se observa el efecto del campo cristalino en la subred de espines S , que es la más susceptible a cambios en D . De las curvas podemos observar que la magnetización de esta subred decae más rápidamente a medida que D disminuye, lo cual es de esperarse, ya que cuando $D \rightarrow -\infty$, los espines S tienden a tomar el valor cero. El cambio de curvatura en la magnetización está asociado a cambios en el punto de compensación [9]; cambios que pueden observarse en la Fig. 2.

El diagrama de fases del modelo $J_1 - J_2 - D$ se presenta en la Fig. 2, donde se muestran los valores de T_{cr} y T_{comp} en función de D . Encontramos que existe un valor mínimo del campo cristalino, D_{cr} , tal que sólo existen puntos de compensación si $D > D_{cr}$. Este valor crítico depende de los otros parámetros del hamiltoniano. En la figura se indica el valor

de D_{cr} para el valor de J_2 escogido para este estudio. Cuando $D > D_{cr}$ el sistema exhibe temperatura de compensación, la cual tiende a aumentar con D hasta alcanzar un valor constante para valores suficientemente grandes de D . Esto se debe a que para $D \gg 0$ la probabilidad de que los espines S tomen el valor cero es muy baja. A partir de ese punto T_{comp} se hace independiente del aumento de D ; algo similar ocurre con la T_{cr} , que muestra una dependencia menor con el valor de D .

4. Conclusiones

Hemos presentado un estudio numérico basado en el algoritmo de Monte Carlo del comportamiento magnético de un modelo ferrimagnético mixto de espines $\pm 1/2$ y espines $\pm 1, 0$, con interacciones a primeros y segundos vecinos, así como campo cristalino. Encontramos que T_{cr} y T_{comp} dependen

del valor del campo cristalino, D . Hay un valor mínimo del campo tal que si $D < D_{cr}$ desaparece el punto de compensación. Cuando $D \ll D_{cr}$ el modelo se comporta como un modelo de Ising estándar de espines $1/2$, con interacción a primeros vecinos J_2 . Cuando $D > D_{cr}$ tanto T_{cr} como T_{comp} aumentan al aumentar el valor de D , hasta que ambas alcanzan valores constantes para un valor de $D \gg 0$, que depende de los otros parámetros del hamiltoniano.

Estos resultados indican que el comportamiento de los puntos de compensación depende fuertemente del valor del campo cristalino, lo que sugiere la posibilidad de calibrar las temperaturas de compensación. De esta manera se pueden favorecer las condiciones para el grabado magnético de información, mediante la experimentación con materiales que tengan ordenamiento magnético semejante pero de distinta anisotropía.

-
1. Shin-Ichi Ohkoshi, Y. Abe, A. Fujishima y K. Hashimoto, *Phys. Rev. Lett.* **40** (1999) 1285.
 2. C. Mathonière, Ch.J. Nuttal, S.G. Carling y P. Day, *Inorg. Chem.* **35** (1996) 1201.
 3. K. Inoue, F. Kwahori y H. Iwamura, *Coord. Chem. Rev.* **198** (2000) 219.
 4. M. Multigner, S. Lakamp, G. Pounoy, A. Hernando y R. Valenzuela, *Appl. Phys. Lett.* **696** (1996) 2761.
 5. S.A. Chavan, R. Granguly, V.K. Jain y J.V. Yakhmi, *J. Appl. Phys.* **79** (1996) 5260.
 6. G.M. Buendía y E. Machado, *Phys. Rev. B* **61** (2000) 14686.
 7. T. Kaneyoshi, *Phys. A* **218** (1995) 46; T. Kaneyoshi, *Phys. A* **229** (1996) 166; T. Kaneyoshi, *J. Phys.: Condens. Matter* **8** (1996) 4515.
 8. A. Bobak y M. Jurcisin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **204** (1997) 787; A. Bobak y D. Horváth, *Phys. Stat. Sol. (b)* **213** (1999) 459.
 9. G.M. Buendía y M.A. Novotny, *J. Phys.: Condens. Matter* **9** (1997) 5951; G.M. Buendía, M.A. Novotny y J. Zhang, in *Computer Simulations in Condensed Matter Physics VII*, ed. D.P. Landau, K.K. Mon, and H-B. Shüttler (Springer, Berlin 1994).
 10. G.M. Buendía y R. Cardona, *Phys. Rev. B* **59** (1999) 6784.
 11. G.M. Buendía y N. Hurtado, *Phys. Status Solidi (b)* **220** (2000) 959.
 12. C.J. Liu, H.B. Schuttler y J.Z. Hu, *Phys. Rev. E* **65** (2002) 01614.