



UNIVERSIDAD DE ORIENTE  
NÚCLEO DE SUCRE  
ESCUELA DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

COMPORTAMIENTO DE LA SUSCEPTIBILIDAD MAGNÉTICA EN  
ALEACIONES  $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$ .  
(Modalidad: Investigación)

ZABDI JOELI PÉREZ RODRÍGUEZ

TRABAJO DE GRADO PRESENTADO COMO REQUISITO PARCIAL PARA  
OPTAR AL TÍTULO DE LICENCIADO EN FÍSICA

CUMANÁ, 2010

## INDICE

DEDICATORIA .....	i
AGRADECIMIENTO .....	ii
LISTA DE TABLAS .....	iii
LISTA DE FIGURAS .....	iv
RESUMEN .....	v
INTRODUCCIÓN .....	1
MARCO TEORICO .....	8
1.  LOS MATERIALES MAGNETICOS.....	8
2.  LAS ALEACIONES .....	9
3.  INDUCCIÓN MAGNÉTICA Y MAGNETIZACIÓN.....	12
4.  SUSCEPTIBILIDAD MAGNÉTICA.....	14
5.  MÉTODO DE MONTE CARLO.....	17
Algoritmo de metrópolis.....	18
6.  MODELO DE ISING.....	20
RESULTADOS Y DISCUSIÓN .....	24
CONCLUSIONES.....	40
RECOMENDACIONES .....	41
BIBLIOGRAFIA .....	42
ANEXOS .....	45

## DEDICATORIA

A Dios que siempre me protege y me ama  
A mis padres, Linoris y Antonio, quienes con dedicación y esfuerzo me enseñaron a luchar por mis sueños y a valorar la vida.  
A mi hijo Abraham David por ser la mayor alegría de mi vida.  
A mis hermanos Samuel, Antonio Josué y Gerson.  
A mis hermanas Sara, Libni, y Linancy.  
A mis sobrinos y sobrinas.  
A todos ellos por que son parte importante en mi vida y mi razón de ser, los amo.

*Y el señor os haga crecer y abundar en amor  
unos para con otros y para con todos,  
como también os hacemos nosotros  
para con vosotros,  
1Ts. 3:12*

## AGRADECIMIENTO

Ante todo mi mayor agradecimiento a mi señor Dios todopoderoso, quien me ha dado estos años de vida y me ha permitido disfrutar y alcanzar esta meta tan importante para mí y los míos.

A mi familia por su continuo apoyo. En especial quiero agradecer a mis padres la educación que me dan a través de su ejemplo, a mis hermanos porque siempre me han apoyado en todas mis decisiones. Los amo.

Quiero agradecer a un gran número de personas por su colaboración, sin la ayuda de todos ellos esta meta no se habría llevado a termino

A mí querido profesor y amigo Ramón A. López Planes quien es el asesor de esta tesis, mil gracias por su paciencia, por creer en mí y por brindarme su asesoría.

A la señora Nelly Restrepo, a quien considero y estimo como una gran amiga, gracias por que siempre estuvo brindándome su ayuda durante mis años de carrera.

Al Prof. Simón Santos, por su amistad y sobre todo por sus palabras alentadoras cuando en un momento de mi carrera quise declinar.

A todos los Prof. del departamento que de una manera u otra influyeron en mi aprendizaje.

A Novel Cabello (+) porque cuando tenia dificultades me brindaba su mano de manera desinteresada, a Natacha Córdova (NATY) (+) por su invaluable amistad y oportunos consejos.

A Yesenia, Angelemig y Carmen, por apoyarme en todo momento, a José Zabala por ayudarme con el programa Ising.

A todos mis compañeros y amigos, con los que viví y compartí unos bellos momentos, que me permitieron aprender no solo de física, sino también de solidaridad, de compañerismo, de amistad, de trabajo en equipo y de compromiso. Espero puedan reconocerse leyendo estas mismas.

ZABDI JOELI

*Porque Jehová da la sabiduría,  
y de su lengua viene el conocimiento  
y la inteligencia. Pr.2.6*

## LISTA DE TABLAS

Figura 1. Momentos magnéticos del electrón. ....	2
Figura 2. Alineamiento (a) ferromagnético y (b) antiferromagnético. ....	3
Figura 3. Modelo “clásico” de acoplamiento (a) ferro y (b) antiferromagnético, como suma de vectores paralelos o antiparalelos, respectivamente. ....	4
Figura 4. Celda unidad de $ACuO_3$ (A= Se, Te). ....	12
Figura 5. Tipos de materiales magnéticos. ....	14
Figura 6. a) Ciclo de histéresis y curva menor de remagnetización. b) Ciclo mayor y ciclos menores de histéresis. ....	16
Figura 7. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	26
Figura 8. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,1$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	27
Figura 9. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,2$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	28
Figura 10. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,3$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	29
Figura 11. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,4$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	30
Figura 12. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,5$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	31
Figura 13. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,6$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	32
Figura 14. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,7$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	33
Figura 15. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,8$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	34
Figura 16. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,9$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	35
Figura 17. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 1$ en ausencia de un campo magnético externo. $H = 0$ . ....	36
Figura 18. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0$ en presencia de un campo magnético externo. $H = 0,2T$ . ....	37
Figura 19. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 0,5$ en presencia de un campo magnético externo. $H = 0,2T$ . ....	38
Figura 20. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración $x = 1$ en presencia de un campo magnético externo. $H = 0,2T$ . ....	39

## LISTA DE FIGURAS

Tabla 1: Número de configuraciones a sumar en la función de partición canónica para redes cuadráticas bidimensionales .....	22
---	----

## RESUMEN

Se estudió la susceptibilidad magnética de las aleaciones  $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$  usando un modelo Ising 2D, mediante la técnica de simulación de Monte Carlo, para diferentes estructuras obtenidas mediante la variación de  $x$  entre 0 y 1. Los resultados de la susceptibilidad presentaron una transición de fase caracterizada por un “pico” que corresponde a las temperaturas críticas de transición magnética. La susceptibilidad es descrita por el modelo en el rango de concentraciones estudiadas, se evidencia que estas aleaciones presentan para  $x$  menores de 0,3 transiciones ferromagnéticas. En  $x = 0,3$  observamos una combinación de comportamiento tanto ferromagnético como antiferromagnético, característico de la susceptibilidad en vidrios de espín. Para valores mayores a 0,3 se evidencia un comportamiento antiferromagnético, acorde con lo resultados reportados en la literatura.

## INTRODUCCIÓN

El fenómeno del magnetismo se conoce desde hace miles de años. La manifestación más antigua conocida es la que corresponde a los imanes, que se encuentran en la naturaleza en forma de mineral de magnetita. Después, los chinos descubren el magnetismo terrestre junto con la invención de la brújula y su aplicación a la navegación.

Los materiales magnéticos, presentes en el mundo moderno, constituyen un campo en continuo desarrollo, en el cual coexisten la aplicación de tecnologías adquiridas hace tiempo con nuevas tecnologías, cuyo vertiginoso progreso a partir de los años 80, introdujo avances y aplicaciones tecnológicas impensadas o simplemente que pocos años antes parecieran descabelladas. Estos materiales se encuentran en toda aplicación que involucre tecnología, así por ejemplo, pueden encontrarse en la industria automotriz, la informática, la aeroespacial, la electrónica e instrumentación, en las comunicaciones, los electrodomésticos, la industria, la bioingeniería, la energía, etc. Es decir, muchos de nuestros dispositivos modernos cuentan con materiales magnéticos.

Uno de los aspectos más importantes de los materiales magnéticos es la evolución y/o estabilidad de sus propiedades magnéticas con el tiempo, ellos son sistemas que se encuentran en estados fuertemente apartados del equilibrio termodinámico (salvo excepciones), por lo cual se trata de sistemas metaestables que están evolucionando temporalmente y cuya evolución depende, no sólo del estado del sistema, sino también de las condiciones externas en las que se encuentra el material, es decir temperatura, presión, presencia o ausencia de campo magnético o eléctrico aplicado, etc.

Entre los tipos de de materiales magnéticos con gran aplicación tecnológica se pueden citar: materiales magnéticos duros del tipo SmCo,  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ , películas delgadas en mono y multicapas; óxidos y manganita con efecto de magnetoresistencia y magnetoimpedancia gigante; válvulas de espín, ferrofluidos, etc [1]; sin embargo, también en materiales tradicionales como las ferritas y hexaferritas se han producido avances tecnológicos que han dado lugar a aplicaciones cada vez mas exigentes respecto a la composición de los materiales, realizándose mejoras cada vez más significativa en el entendimiento de la física del magnetismo. El estudio de los materiales magnéticos constituye un área multidisciplinaria, donde se integran la física, la química, la ciencia de los materiales, la ingeniería eléctrica y la electrónica.

Las propiedades magnéticas macroscópicas de los materiales son consecuencia de los momentos magnéticos asociados con electrones individuales y sus espines, los cuales se manifiestan bajo la presencia de un campo magnético externo, estos movimientos generan que cada electrón en un átomo obtiene momentos magnéticos que se originan de dos fuentes, una está relacionada con su movimiento orbital alrededor del núcleo; siendo una carga en movimiento, un electrón se puede considerar como un pequeño circuito cerrado de corriente, generando un campo magnético muy pequeño y teniendo un momento magnético a lo largo de su eje de rotación (figura 1a).

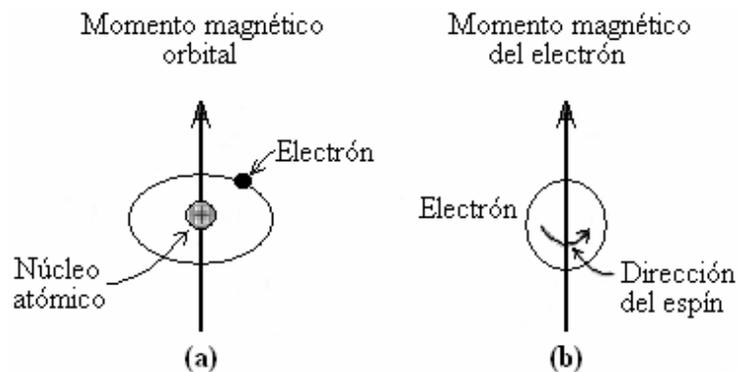


Figura 1. Momentos magnéticos del electrón.

Cada electrón además se puede considerar rotando alrededor de su eje, el otro momento magnético se forma de la rotación (espín) del electrón el cual se dirige a lo largo del eje de rotación y puede estar hacia arriba ó hacia abajo, según sea la dirección de rotación del electrón (figura 1b).

Los átomos vecinos están acoplados por una fuerza que tiende a orientar los espines en la red dando origen a distinguir un par de tipos de acoplamiento opuestos entre momentos magnéticos, denominados por motivos históricos, ferro- y antiferromagnético, respectivamente. Estos presentan un momento dipolar magnético espontáneo en ausencia de un campo magnético aplicado que puede ser observado para temperaturas inferiores a la temperatura de Curie ( $T_C$ ), los momentos magnéticos a escala microscópica están ordenados. (Figura 2a).

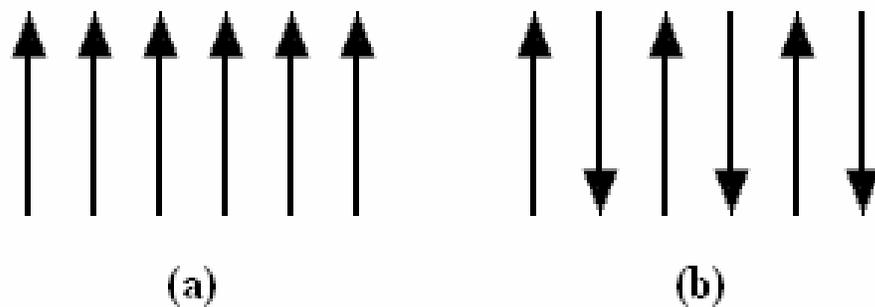


Figura 2. Alineamiento (a) ferromagnético y (b) antiferromagnético.

A temperaturas mayores a  $T_C$ , la agitación térmica provoca que los momentos dejen de estar alineados (figura 2b). En sistemas sencillos, con dos momentos magnéticos acoplados por canje isótropo, tendremos siempre un estado ferromagnético y otro antiferromagnético.

Los electrones desapareados de diferentes átomos también pueden interactuar entre si, este fenómeno se conoce como acoplamiento magnético, el cual es responsable de alinear los momentos magnéticos de los espines. Si el acoplamiento se

da entre dos espines y estos se alinean en dirección paralela se dice que el acoplamiento es ferromagnético, y el momento magnético total  $S_{\text{tot}}$  es igual a la suma de sus momentos magnéticos  $S_1$  y  $S_2$ , (Figura 3a). En contraposición, se llama acoplamiento antiferromagnético al que hace que su alineamiento sea antiparalelo y el momento magnético total sea el valor absoluto de la diferencia de los momentos magnéticos. (Figura 3b)

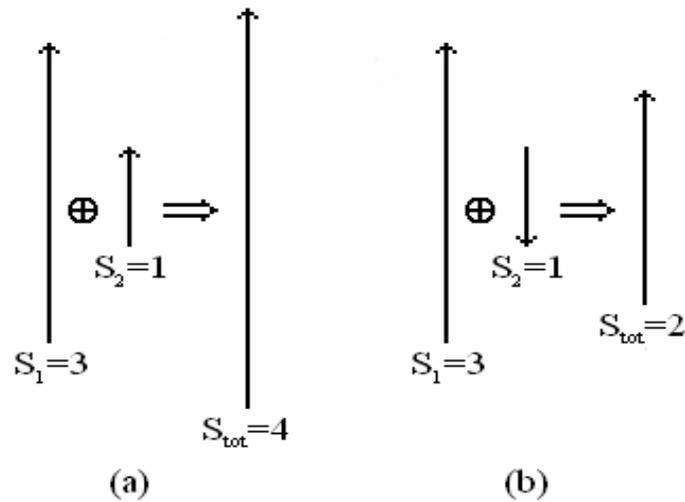


Figura 3. Modelo “clásico” de acoplamiento (a) ferro y (b) antiferromagnético, como suma de vectores paralelos o antiparalelos, respectivamente.

Los acoplamientos magnéticos o interacciones de canje son una consecuencia de la naturaleza cuántica del sistema. La teoría mecánico cuántica explica el origen de los momentos magnéticos.

En sistemas sencillos, con dos momentos magnéticos acoplados por canje isótropo, tendremos siempre un estado ferromagnético y otro antiferromagnético, separados por cierta energía. Si el estado antiferromagnético (o de mínimo momento magnético) es el nivel energético fundamental, diremos que la interacción es antiferromagnética; a baja temperatura, cuando únicamente esté poblado el estado antiferromagnético, el compuesto será diamagnético. Si por el contrario, el nivel fundamental es el ferromagnético (o de máximo momento magnético), diremos que la

interacción es ferromagnética; a baja temperatura, el compuesto se comportará como si fuera paramagnético (con un momento magnético elevado), o si la interacción se extiende a todo el sólido, como un imán.

En sistemas complejos, bien porque hay más de dos momentos magnéticos acoplados o bien porque la interacción entre ellos se exprese en diferentes componentes, nos encontraremos con esquemas más complicados. Por ejemplo, cuando en un sistema de varios centros coexisten interacciones ferro- y antiferromagnéticas, o halla interacciones antiferromagnéticas que compitan entre sí, el estado fundamental será, generalmente, uno de los estados de espín intermedio.

En metales de transición existe una interacción débil entre los centros metálicos dominada por el acoplamiento del espín entre los electrones desapareados de los metales, a través de un ligando puente. En general existe una fuerte relación entre el comportamiento magnético de dichos compuestos y los factores estructurales.

La anisotropía de canje es un fenómeno que se reveló inesperadamente en un experimento. Fue en 1957 cuando Meijkeljohn & Bean [2] descubrieron un desplazamiento de la curva de imanación tras haber enfriado una muestra compacta formada por pequeñas partículas de cobalto, de tamaños comprendidos entre 10 nm y 100 nm, en presencia de un campo magnético.

La anisotropía de canje es un fenómeno que en general se presenta en sistemas magnéticos en los que existe interacción entre entidades con orden ferromagnético (FM) y entidades con orden antiferromagnético (AFM), y que se manifiesta a temperaturas en las que ambos órdenes coexisten.

La causa principal de anisotropía en el momento magnético es la mezcla del momento magnético del espín con un momento magnético orbital, como describe el hamiltoniano de interacción espín-órbita:

$$\hat{L}\hat{S} = \lambda \cdot \hat{L}_i \cdot \hat{S}_i \quad (1)$$

En consecuencia, lo lógico sería calcular la interacción isótropa de momentos magnéticos anisótropos. Se da el caso en cambio, de que es operativamente más sencillo el tratar a los momentos magnéticos como si fueran isótropos, e introducir la anisotropía de forma “efectiva” en la interacción de canje, que proceder de forma inversa, y así se hace habitualmente. Éste es el origen del llamado “canje anisótropo”, este es el principal aporte a la magnetización del material.

Recientemente se le ha prestado un interés fundamental y práctico al entendimiento estructural del magnetismo, y su estudio ha sido tema para diferentes metales y aleaciones. Como punto de partida para el estudio teórico del magnetismo, ya en los años 50 Anderson [3] propuso la primera interpretación teórica al comportamiento magnético de los materiales.

En los últimos años, aleaciones con presencia de oxígeno han sido de gran interés para el estudio de propiedades magnéticas, debido a su gama de aplicaciones a nivel tecnológico [4], motivado a esto han sido objeto de una renovada atención los sistemas laminares de los óxidos de cobre.

En los años 80 y también con compuestos binucleares de cobre se establecieron las primeras aproximaciones cuantitativas para evaluar la constante de acoplamiento magnético. De Loth *et al.* [5] utilizaron la teoría de perturbaciones para realizar el análisis de las contribuciones físicas que contribuyen al acoplamiento magnético y

demonstraron que la inclusión de la correlación dinámica es crucial para reproducir el orden de magnitud del acoplamiento.

Las aleaciones  $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$  (STCO) son sistemas de particular importancia para el estudio de propiedades magnéticas ya que los cambios inducidos en la composición estructural controlan sus interacciones magnéticas.

Las aleaciones STCO tienen una celda unidad formada por 20 átomos, son de estructura perovskite torcido con los iones tanto de  $\text{Se}^{4+}$  como de  $\text{Te}^{4+}$  en la posición de un catión, este hecho permite enlaces Cu-O-Cu, diferenciándose solo por pequeñas variaciones en las posiciones atómicas y la constante de red [6], donde las distorsiones estructurales producen un cambio en el estado magnético.

En este trabajo se estudiará la susceptibilidad magnética para  $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$  (STCO), por lo que es necesario conocer la estructura de la celda unitaria, ya que a partir de la posición de cada uno de los átomos podemos determinar las interacciones que se dan entre ellos y de esta manera, hallar las constantes de interacción o de intercambio magnético, la cual a su vez nos permitirá estudiar el comportamiento de la magnetización y de la susceptibilidad de estos materiales y sus variaciones en función de la temperatura.

En el marco teórico se describen en forma detallada y sencilla las bases teóricas en las que se fundamenta este trabajo, luego se presentan los resultados y la discusión de estos.

Finalmente se dan las conclusiones más significativas del trabajo y se describen las expectativas sobre futuras investigaciones en este tema.

## MARCO TEORICO

### 1. LOS MATERIALES MAGNETICOS

Los materiales magnéticos han sido utilizados desde la antigüedad como brújulas y como juguetes mágicos. A fines del siglo XIX, tras la formulación de la ley de Faraday se inicia la aplicación industrial del magnetismo, y desde entonces los materiales magnéticos han sido importantes para la tecnología. Una clasificación magnética de los materiales según Brailsford [7], indica que los materiales pueden ser: diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos, antiferromagnéticos y ferrimagnéticos.

Los diamagnéticos son materiales que al aplicarles un campo magnético producen una magnetización de signo opuesto al del campo aplicado.

Los paramagnéticos son materiales en los cuales el desorden térmico de los átomos es el responsable de la oposición al ordenamiento magnético de tal manera que resulta una magnetización neta nula.

Los ferromagnéticos son materiales en los cuales los momentos magnéticos de los átomos tienden a alinearse paralelamente de tal manera que resulta una magnetización neta no nula. Este fenómeno ocurre a temperatura ambiente para el hierro, níquel y cobalto, ocurriendo también en otros elementos a bajas temperaturas. Todos estos elementos tienen la propiedad de volverse paramagnéticos cuando se les calienta por encima de una temperatura crítica, llamada temperatura de Curie,  $T_c$ .

Los antiferromagnéticos son materiales en los cuales los momentos magnéticos de los átomos tienden a alinearse antiparalelamente de tal manera que la

magnetización neta resultante sea nula. Estos materiales están caracterizados por presentar una discontinuidad en la curva de susceptibilidad en función de la temperatura, llamada punto Néel o temperatura de Néel,  $T_N$ . Por debajo de esta temperatura el material es ordenado y antiferromagnético, mientras que por encima de esta temperatura el material se comporta como paramagnético, como por ejemplo sucede con el manganeso y el cromo.

Los ferrimagnéticos pueden considerarse como un caso especial de los materiales antiferromagnéticos, en los cuales el sistema magnético presenta un orden magnético, pero está compuesto por dos subsistemas iónicos magnéticos desiguales y antiparalelos (en cuanto a la orientación de la magnetización neta de cada subsistema) produciendo una magnetización neta no nula debida a la diferencia entre los momentos magnéticos de cada subsistema. Tal es el caso de la magnetita  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  y de las ferritas que son ferrimagnéticas, con propiedades magnéticas similares a la de los materiales ferromagnéticos.

Además de los materiales mencionados, hay otros materiales magnéticos con acoplamiento menos básicos llamados vidrios de espín [8], estos son sistemas en los que los acoplamientos magnéticos entre los distintos átomos son aleatorios, tanto ferromagnético como antiferromagnético y presentan un fuerte de frustración. Se dice que el desorden que presenta es reconocido debido a que los valores de dichos acoplamientos aleatorios permanecen congelados durante el tiempo de observación.

## **2. LAS ALEACIONES**

Los aleantes tienen por objeto modificar en un sentido determinado las condiciones de los metales, tratando de mejorar bajo el punto de vista utilitario, ya sea su aspecto o su resistencia mecánica. Las aleaciones resultan a veces verdaderas

combinaciones químicas, pero en la mayoría de los casos son simplemente mezclas bastante homogéneas, como puede comprobarse con el examen microscópico.

Puesto que el cobre puro cristaliza en una estructura cúbica de caras centradas [9], no ofrece dificultades su transformación de la forma moldeada a la forjada, pero se pueden encontrar casos en que el cobre sea frágil. Las propiedades de resistencia mecánica y a la corrosión del cobre pueden ser mejoradas por impurezas de aleantes. Las aleaciones con cobre poseen una combinación de propiedades físicas que han sido utilizados en múltiples aplicaciones desde la antigüedad. En general, poseen gran ductilidad y maleabilidad, son mas pesadas que el hierro, su resistencia mecánica específica es menor que la del aluminio, tienen mejor resistencia a la fatiga, a la termofluencia y al desgaste que las aleaciones de Mg y Al.

Muchas de estas aleaciones son muy útiles en la técnica y para variados instrumentos industriales de corriente y para las instalaciones químicas. Las propiedades del cobre que inducen a su empleo en estas últimas son: 1) excelente resistencia a la corrosión para una amplia variedad de agentes; 2) gran ductilidad, lo que les permite ser hechurado en cualquier forma deseada; 3) buena resistencia a tracción, que las mantiene a moderadas temperaturas; 4) facilidad de soldadura según varios métodos [10].

Las cantidades residuales de impurezas ejercen una influencia perniciosa en las propiedades del cobre. Bismuto, flúor, selenio y telurio son los que actúan mas adversamente en las condiciones de deformación en caliente y en frio, porque son pocos solubles en el cobre y forman fases aisladas que tienen puntos de fusiones bajas [10].

Ciertos elementos de aleación se añaden con objeto de mejorar algunas de las propiedades básicas del cobre. El teluro es casi insoluble en el cobre a temperatura

ordinaria y forma teluros que precipitan en los bordes de grano, facilitando la rotura de la viruta, proporcionando una maquinabilidad comparable a la de los latones con plomo. La adición de teluro aumenta la temperatura de recristalización, es decir, retiene la acritud durante el calentamiento, como la plata, pero de forma más intensa. Su conductividad eléctrica es de 94 a 98%, y las mecánicas son similares a las del cobre sin alear.

### **Principales aplicaciones del cobre y sus aleaciones**

- El cobre con <1% de impurezas se utiliza en componentes eléctricos.
- Las adiciones de Cd, Ag y Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> mejoran la dureza del cobre sin disminuir significativamente su conductividad.
- Bombas y Válvulas
- Componentes de plomería
- Arquitectura y decoración

Las aleaciones Se<sub>1-x</sub>Te<sub>x</sub>CuO<sub>3</sub> han presentado estupendas características de conductividad eléctrica y superresistencia, tienen una celda unidad formada por 20 átomos [6], como se muestra en la figura 4.

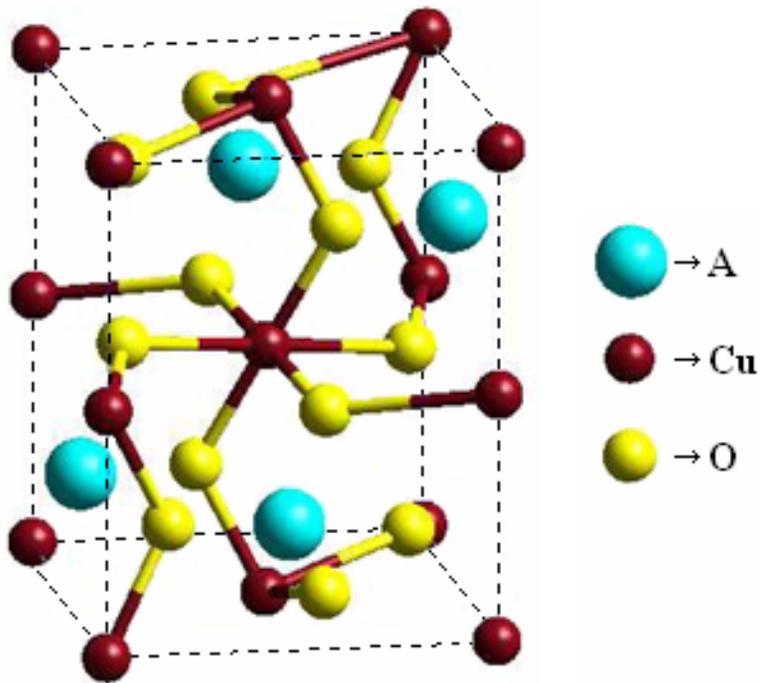


Figura 4. Celda unidad de  $ACuO_3$  (A= Se, Te).

Estas aleaciones son sistemas donde las interacciones magnéticas son controladas por cambios dependientes de composición estructural, es decir, el aumento de las concentraciones  $x$  da como resultado distorsiones estructurales que cambian el estado magnético de FM a AFM. La clave estructural es la posición que ocupan los átomos Se y Te en relación a Cu-O-Cu. [11]. Como el átomo Se/Te se acerca al grupo Cu-O-Cu, estos actúan como válvulas magnéticas y reducen la contribución de súper cambios (SE) al acoplamiento magnético. SE favorece el antiferromagnetismo y, así, esta disminución permite al cambio directo entre electrones Cu-3d para dar una interacción FM. [6].

### 3. INDUCCIÓN MAGNÉTICA Y MAGNETIZACIÓN

Cuando un campo magnético,  $H$ , es aplicado a un material, la respuesta del material es llamado inducción magnética  $B$ . La relación entre  $B$  y  $H$  es una propiedad

del material. En algunos materiales (y en el espacio vacío)  $\mathbf{B}$  es una función lineal de  $\mathbf{H}$  pero en general es mucho más complicado, y algunas veces no fácil de evaluar la relación entre  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{H}$ .

$$\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M} \quad (2)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) \quad (3)$$

Donde  $\mathbf{M}$  es la magnetización del medio y  $\mu_0$  es la permeabilidad del espacio libre.

La magnetización es definida como el momento magnético por unidad de volumen,

$$\mathbf{M} = \frac{\tilde{\mathbf{m}}}{V} \quad (4)$$

$\mathbf{M}$  es una propiedad del material, y depende de los momentos magnéticos individuales de los iones, átomos o moléculas constituyentes y como estos momentos dipolares actúan entre ellos [12,13].

La densidad de flujo magnético de un material en el interior es diferente que en el exterior. En realidad los materiales magnéticos pueden ser clasificados basados en la diferencia entre el flujo externo y el flujo interno.

Si el flujo magnético interior es mucho menor que el flujo magnético exterior entonces el material es conocido como diamagnético. Estos materiales tienden a excluir el campo magnético desde su interior. Su momento dipolar es cero. Si el flujo magnético interior es levemente mayor que el flujo exterior entonces el material puede ser paramagnético o antiferromagnético. En materiales paramagnéticos y antiferromagnéticos, los átomos o iones constituyentes tienen momento magnético dipolar. En paramagnéticos, estos momentos dipolares son aleatoriamente orientados,

y en los antiferromagnéticos, ellos son ordenados antiparalelos uno del otro. Finalmente, si el flujo magnético interior es mucho más grande que el flujo exterior entonces el material es ferromagnético o ferrimagnético (Figura 5.)

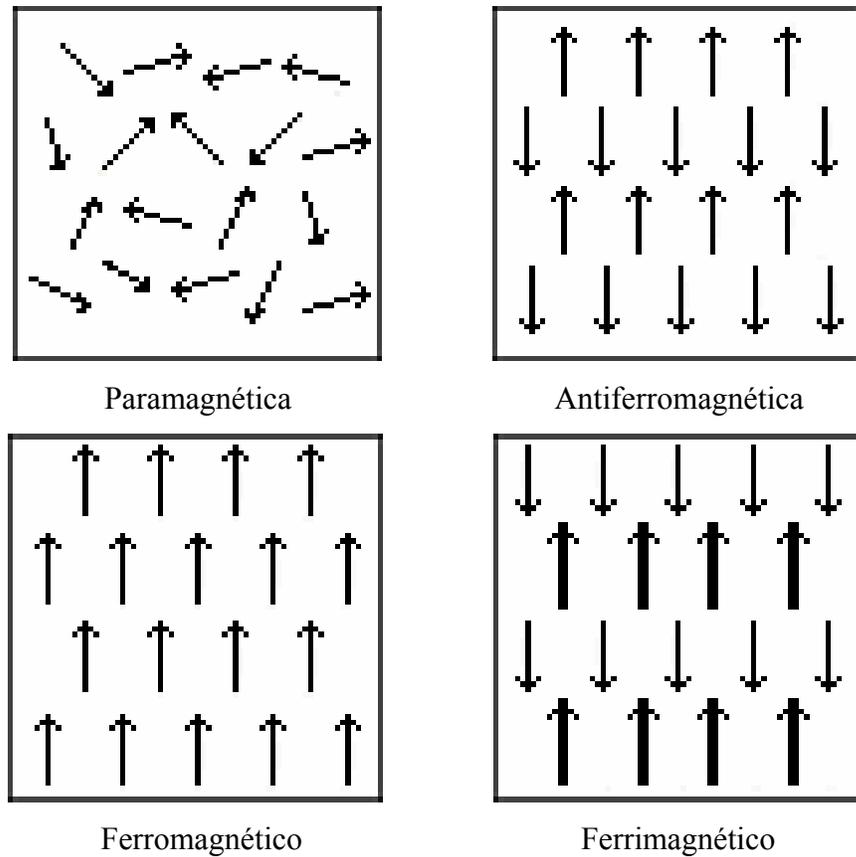


Figura 5. Tipos de materiales magnéticos

#### 4. SUSCEPTIBILIDAD MAGNÉTICA

La susceptibilidad magnética  $\chi$  es una propiedad inherente característica de todos los materiales, y nos permite describir la forma y grado de magnetización como responde un material en presencia de un campo magnético de intensidad  $H$ . Se

define como la razón entre la magnetización inducida en un material, ó polarización magnética, y la intensidad de campo al cual está sujeto.

$$\chi = \frac{\partial \vec{M}}{\partial \vec{H}} \quad (5)$$

Si la sustancia adquiere una magnetización en el mismo sentido o en sentido contrario al campo decimos que la sustancia es paramagnética o diamagnética respectivamente.

La fuerza de interacción entre un material y un campo magnético externo  $\mathbf{H}$ , depende, además de la intensidad de este campo, del valor de la susceptibilidad magnética del material. Cuando el material no presenta una homogeneidad en la susceptibilidad magnética al ser medido en diferentes direcciones del espacio, decimos que el material posee una anisotropía magnética. En algunos sistemas, con esta consideración no es posible reproducir, ni el esquema de niveles de energía determinado por técnicas espectroscópicas, ni en consecuencia, las propiedades macroscópicas medidas por técnicas termodinámicas.

La susceptibilidad esta definida como la derivada de la magnetización respecto del campo magnético aplicado. Sin embargo, cuando tratamos con materiales que presentan histéresis en su magnetización, debemos diferenciar las llamadas susceptibilidad total  $\chi_{tot}$ , susceptibilidad reversible  $\chi_{rev}$  y la susceptibilidad irreversible  $\chi_{irr}$ . La susceptibilidad total  $\chi_{tot}$ , está definida como la pendiente local de la curva de desmagnetización del ciclo de histéresis ó también, como la pendiente local de una curva menor de remagnetización [14], (ver figura 6a). La susceptibilidad reversible se define como la pendiente de un ciclo menor realizado a partir de un punto dado perteneciente al ciclo mayor de histéresis, como se esquematiza en la figura 6b.

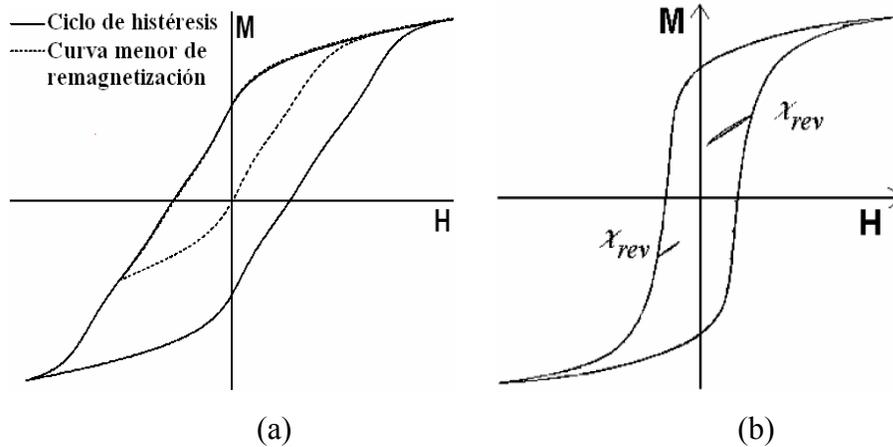


Figura 6. a) Ciclo de histéresis y curva menor de remagnetización. b) Ciclo mayor y ciclos menores de histéresis.

La observación del comportamiento oscilatorio de la susceptibilidad de un cristal tridimensional de bismuto, que de Haas y van Alphen realizaron en la década de los años treinta, fue la primera confirmación experimental de la existencia del espectro energético que Landau había predicho teóricamente al estudiar el diamagnetismo de los electrones libres [15]. Sin embargo, transcurrieron varios años antes de poder explicar el fenómeno desde un punto de vista teórico. Fue Onsager, quién primero comprendió su relación con la geometría de la superficie de Fermi del material [16]. Inmediatamente después Dingle, efectuó los primeros desarrollos cuantitativos basados en el cálculo del potencial termodinámico de un sistema electrónico en presencia de un campo magnético, aunque fueron Lifshitz y Kosevich quienes en 1954 encontraron la expresión definitiva para la susceptibilidad magnética oscilatoria [17, 18].

La susceptibilidad magnética de un sistema electrónico en campos magnéticos débiles, cuando todavía no se han manifestado los efectos cuánticos, no puede calcularse de forma general. En la teoría del líquido de Fermi se consideran únicamente los electrones de conducción cerca de la superficie de Fermi, de modo que sólo puede obtenerse la parte paramagnética de la susceptibilidad de los

electrones próximos a dicha superficie energética. En este caso paramagnético los espines de los electrones de la zona interior de la distribución se compensan entre sí y no contribuyen. Sin embargo, la parte diamagnética de la susceptibilidad contiene contribuciones de todos los electrones, incluyendo los del interior de la distribución, donde no puede utilizarse la teoría del líquido de Fermi. Las partes de la susceptibilidad tienen en general el mismo orden de magnitud y únicamente tiene significado físico real su suma.

El cálculo directo de  $H$  y de las cantidades termodinámicas asociadas al sistema es muy difícil, por lo que es necesario recurrir a la simulación numérica para el estudio de nuestro sistema.

## **5. MÉTODO DE MONTE CARLO**

Los dos métodos de simulación computacional más usados en física actualmente son el de la Dinámica Molecular (MD) [19 - 23], que es de carácter determinista, y el de Montecarlo (MC), que es de carácter probabilístico [24]. Ambos pueden considerarse como métodos para generar configuraciones diferentes de un sistema de partículas, es decir puntos en el espacio de fases compatibles con las condiciones externas.

Monte Carlo es un método de carácter probabilístico o estocástico, que hace uso intensivo de un generador a números aleatorios en su funcionamiento. Precisamente su nombre es en honor a la ciudad de Montecarlo, famosa por sus casinos, ruletas y juegos de azar, entre otras diversiones.

Este método resulta ser muy útil en varias áreas de la física y campos relacionados y para muchos problemas se ha convertido en el más poderoso método numérico disponible. Los aspectos estudiados incluyen propiedades estructurales,

termodinámicas, mecánicas y cinéticas. En particular el método de MC se emplea con éxito en Física de partículas, así como para calcular sistemas cuánticos.

Las simulaciones Monte Carlo consisten en generar cadenas de Markov de estados del sistema a temperatura constante  $T$ , es decir, series de tiempo de las cantidades definidas como la energía interna del sistema y el cuadrado de la magnetización. Una cadena de Markov es un proceso donde la variable estocástica asume valores discretos en tiempos discretos. La probabilidad  $P(x_1, t \mid x_2, t + 1)$  se denomina en este caso probabilidad de transición por unidad de tiempo y la denotaremos por  $P_t(x_1 \rightarrow x_2)$ .

La cantidad de iteraciones o pasos de Monte Carlo (*mcs*) que realiza el algoritmo sobre estados del sistema, es llamado tiempo de Monte Carlo  $N_{MC}$ . Los estados así muestreados estarán distribuidos siguiendo la estadística de Boltzmann (ensemble canónico,  $T$  constante), toda vez que el método sea ergódico y cumpla con el principio de balance detallado, característico de los sistemas físicos en equilibrio termodinámico [25 - 28]. La ergodicidad consiste en que el algoritmo sea capaz de visitar todos los estados accesibles del sistema si  $N_{MC} \rightarrow \infty$ . El equivalente es que el proceso de Markov este diseñado de tal manera que pueda pasar de un estado a cualquier otro, si la cadena es lo suficientemente larga.

### **Algoritmo de metrópolis**

El algoritmo de Metrópolis es un proceso de Markov en el cual se construye una cadena aleatoria (random walks) de tal modo que la probabilidad de visitar un punto particular  $\bar{r}^N$  es proporcional al factor de Boltzmann  $\exp(-\beta E)$ . De hecho hay varias maneras de construir tal cadena aleatoria. El algoritmo de Metrópolis es sólo una de ellas, la más usada.

El algoritmo de metrópolis para un sistema de  $N$  partículas sometidas a una temperatura  $T$ , se implementa de la siguiente manera:

1. Seleccione una partícula  $n_i$  cualquiera y calcule su energía  $E'_i(r)$ .
2. Se da a la partícula un desplazamiento aleatorio  $r' = r + \Delta r$  y se calcula su energía  $E'_i(r)$ .
3. Si  $\Delta E < 0$ ; acepta la nueva configuración como la siguiente de la cadena y vuelve a 1.  
Si  $\Delta E > 0$ , escoja un número  $\alpha$  al azar entre  $[0,1]$ 
  - Si  $\alpha < \exp(-\beta\Delta E)$ , acepte y vuelva a 1.
  - Si  $\alpha > \exp(-\beta\Delta E)$ , rechace la movida, es decir conserva la posición de la partícula en  $n_i$ , y vaya a 1.
4. Luego de barrer la  $N$  partículas, guarde la configuración obtenida y vuelva a 1 para comenzar otro ciclo. Después de un número razonable de pasos valla a 5.
5. Calcule la propiedad física de interés a partir de las configuraciones guardadas. Fin.

A menudo es costumbre usar, en vez de la probabilidad  $\exp(-\beta\Delta E)$ , la probabilidad normalizada  $1/(1 + \exp(\beta\Delta E))$ . Esto no cambia los resultados del equilibrio, y tiene la ventaja que el método converge más rápido para altas temperaturas.

Tomemos como ejemplo el modelo de Ising en una red de  $N$  espines. Una manera simple de elegir la nueva configuración es elegir un espín  $s_i$  e invertirlo (“spin flip”)  $s_i \rightarrow -s_i$ . Los espines  $s_i$  pueden elegirse en las sucesivas configuraciones de la siguiente manera:

- Secuencialmente, recorriendo la red de alguna manera hasta completar los  $N$  espines.
- Aleatoriamente, sorteando en cada paso un espín con igual probabilidad ( $1/N$ ) entre todos los espines de la red.

Las probabilidades de transición serán en este caso:

$$P(r \rightarrow r') = \begin{cases} \frac{1}{A} & \text{si } \Delta E \leq 0 \\ \frac{1}{A} e^{-\beta \Delta E} & \text{si } \Delta E > 0 \end{cases} \quad (6)$$

Para las configuraciones  $r'$  que difieran de  $r$  en un spin y cero para las restantes.  $A$  es una constante de normalización que vale 1 para el caso secuencial, si el spin elegido es el siguiente en la secuencia, y  $N^{-1}$  para el caso aleatorio (transiciones a estados con mas de un spin flip tienen probabilidad cero).

## 6. MODELO DE ISING.

El modelo de Ising es la descripción mas simple del magnetismo por simular la estructura de una sustancia ferromagnética real [29], de hecho de forma más precisa, el modelo simula un dominio de una sustancia ferromagnética.

Este modelo fue inventado por Wilhelm Lenz en 1920 y es llamado así por Ernest Ising, un estudiante de Lenz que eligió el modelo como tema de su tesis doctoral [30] en 1925. Su principal virtud reside en el hecho que el modelo de Ising bidimensional para una red cuadrada infinita admite un tratamiento exacto en mecánica estadística, es el único ejemplo no trivial de transición de fase que se puede desarrollar con total rigor matemático.

Este modelo consiste en un sistema de  $N$  puntos fijos que forman una red periódica  $D$ -dimensional en presencia de un campo magnético externo  $\mathbf{H}$  en la

dirección de  $z$ . Asociada a cada punto de la red hay un átomo, supongamos que todos los átomos tienen espín  $\frac{1}{2}$  y pueden tomar únicamente dos valores numéricos:  $+1$  (spin up) y  $-1$  (spin down). La configuración microscópica del sistema viene dada por el conjunto de los valores de los espines  $s_i$ ,  $i=1, \dots, N$ . La energía total del sistema viene dada por:

$$\mathcal{H}(s_i) = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i \quad (7)$$

Donde  $\langle i,j \rangle$  indica que la suma sólo se ha de realizar para primeros vecinos. El término  $s_i s_j$  mide la energía magnética asociada a pares de spines cada uno de los cuales crea un campo  $\vec{H}_i$ , por lo tanto la energía asociada a cada par es proporcional a  $\sum s_i s_j$  si se considera la interacción homogénea e isotropa, el acoplamiento entre espines es independiente de las posiciones en la red

$$\mathcal{H}(s_i) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i \quad (8)$$

Si  $J > 0$  el Hamiltoniano corresponde a un material ferromagnético, mientras que si  $J < 0$  el sistema es antiferromagnético.

La función de partición canónica en el modelo de Ising es

$$Q_N(H, T) = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{\beta \mathcal{H}(s_i)} \quad (9)$$

Donde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ . Por lo tanto,  $Q_N$  consta de  $2^N$  sumandos, que es una dependencia que crece muy deprisa con  $N$  como se puede ver en tabla 1.

$l$	$N$	$2^N$
5	25	$3,4 \times 10^7$
10	100	$1,3 \times 10^{30}$
50	2500	$3,8 \times 10^{752}$
200	4000	$1,6 \times 10^{1241}$

Tabla 1: Número de configuraciones a sumar en la función de partición canónica para redes cuadráticas bidimensionales

En la primera columna se indica el número de espines  $l$  en cada arista de la red, mientras en la segunda columna se indica el número total de espines  $N = l^2$ . Se observa que para  $l=5$ , que es una red bastante pequeña  $N=25$  el número de sumandos ya es elevado. Para  $l=10$ , que continúa siendo una red pequeña el número de sumandos es tan grande que si se tardase  $1\mu s$  en explorar cada configuración se necesitaría del orden de  $10^8$  veces la edad actual del universo para explorar todas las configuraciones.

Es por ello que se emplean métodos numéricos aproximados. En vez de realizar la suma sobre todas las configuraciones del sistema, se realiza sobre un cierto número de micro estados  $n \ll 2^N$  escogidos al azar de entre todos los posibles. Entonces, los promedios sobre la colectividad se calculan como

$$\langle A \rangle = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n A(\{s_i\}) \quad (10)$$

Para que estos microestados sean representativos de la colectividad canónica se escogen con una probabilidad proporcional al factor de Boltzmann. Concretamente se emplea el algoritmo de Metrópolis [31] con dinámica de Glauber.

Finalmente, el programa informático trabaja en unidades reducidas. Así, emplea como temperatura.

$$T^* = \frac{Tk_\beta}{J} \quad (11)$$

y en vez de la energía utiliza la variable

$$E^* = \frac{E}{NJ} \quad (12)$$

Según la distribución de Boltzmann.

Y para el cálculo de la susceptibilidad resulta más fácil y preciso el cálculo a través de las fluctuaciones de las magnitudes extensivas asociadas. Así, por ejemplo, para el cálculo de la susceptibilidad isotérmica podemos utilizar la siguiente expresión

$$\chi = \frac{1}{NT} \left( \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) \quad (13)$$

donde N es el número de espines.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El modelo presentado para ver el comportamiento de la susceptibilidad magnética de la aleación  $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$  es Ising 2D, de interacción entre primeros vecinos dado por la ecuación 7. Estas aleaciones corresponden a sistemas de interacción localizada el cual debe tomarse en cuenta para el cálculo apropiado de las variables termodinámicas. Los resultados obtenidos de susceptibilidad magnética son descritos satisfactoriamente por el modelo en un rango de concentraciones entre 0 y 1.

Para cada concentración tenemos una celda de  $l = 30$  y se hace una corrida de temperatura, con 10000 pasos de Monte Carlo y 5000 pasos de añejo, este añejamiento se hace con el fin de obtener una configuración mas probable que aquella correspondiente a todos lo espines orientados en una dirección.

Realizadas todas las simulaciones en ausencia de campo magnético externo ( $H = 0$ ) en la aleación, la susceptibilidad presenta una transición de fase de segundo orden caracterizada por un “pico” en la temperatura crítica y la presencia de dos curvas convexas. Las Figuras 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, muestran el comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura para las aleaciones STCO, en el rango de concentraciones estudiadas.

En las aleaciones cuya concentración esta entre 0 y 0,2 la susceptibilidad representa un comportamiento ferromagnético donde las temperatura criticas de transición magnética esta en el orden de los 20K, 11K y 8K.

En una concentración de  $x=0,3$  la aleación presentó un comportamiento ferromagnético y antiferromagnético característico de los vidrios de espín, cuyo valor de temperatura crítica es de 4,3K.

A partir de  $x= 0,4$  hasta  $x= 1$ , la aleación presentó un comportamiento antiferromagnético cuyas temperaturas críticas se encuentran en 0,5K, 2,2K, 4,8K, 7,4K, 9,8K, 12,2K y 14,2K.

Al final realizamos una corrida para la aleación en presencia de un campo magnético externo bajo  $H = 0,2T$ , con las concentraciones  $x = 0$ ,  $x = 0,5$  y  $x = 1$ , donde se pudo observar que la aleación continua con un comportamiento ferromagnético para la primera concentración, para la segunda y tercera concentración se obtiene un comportamiento antiferromagnético y las temperaturas críticas aumentaron a 15K, 3K y 16,6K.

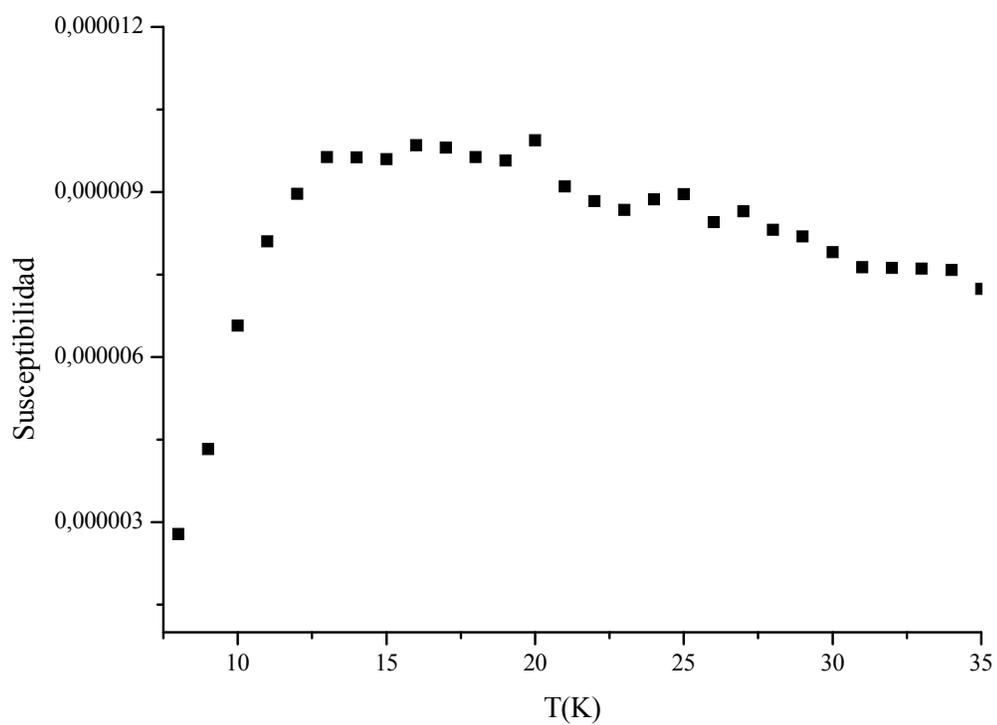


Figura 7. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

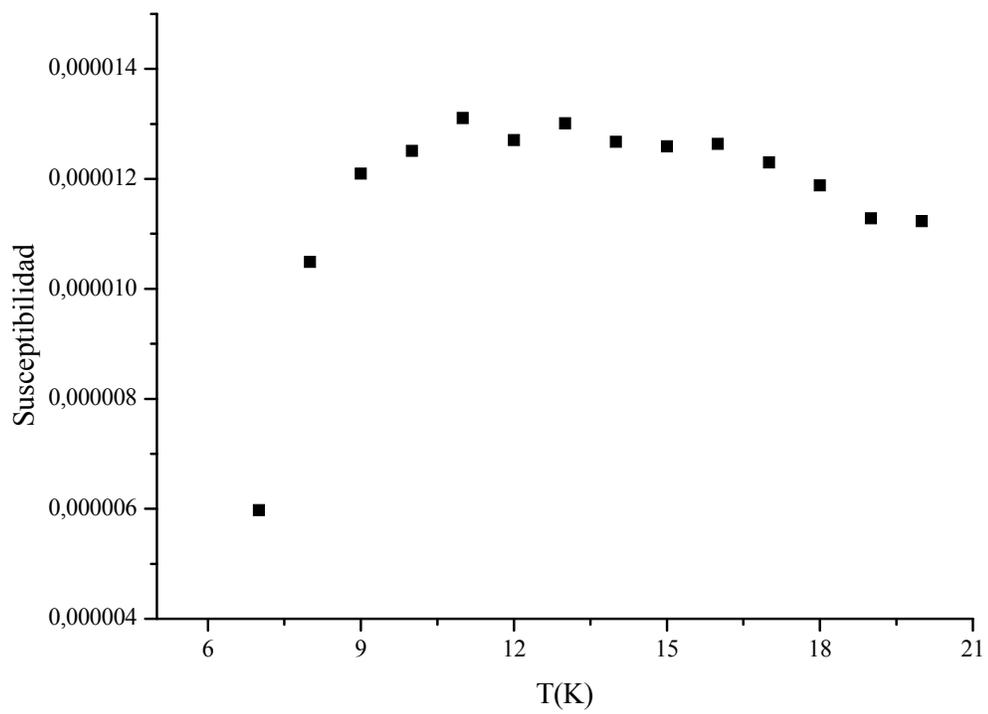


Figura 8. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,1$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

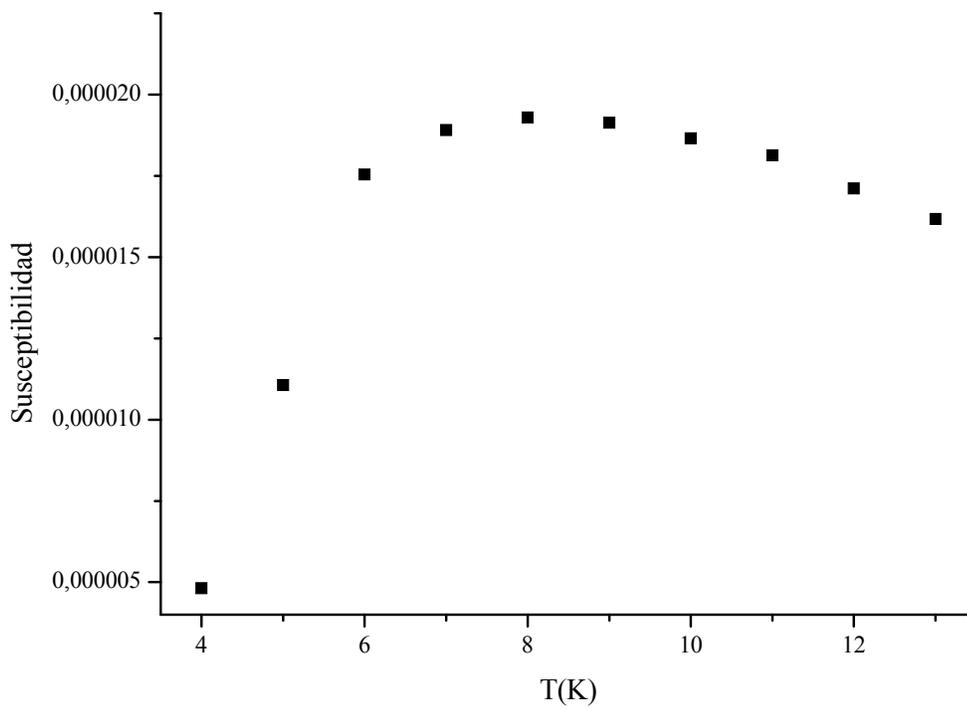


Figura 9. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,2$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

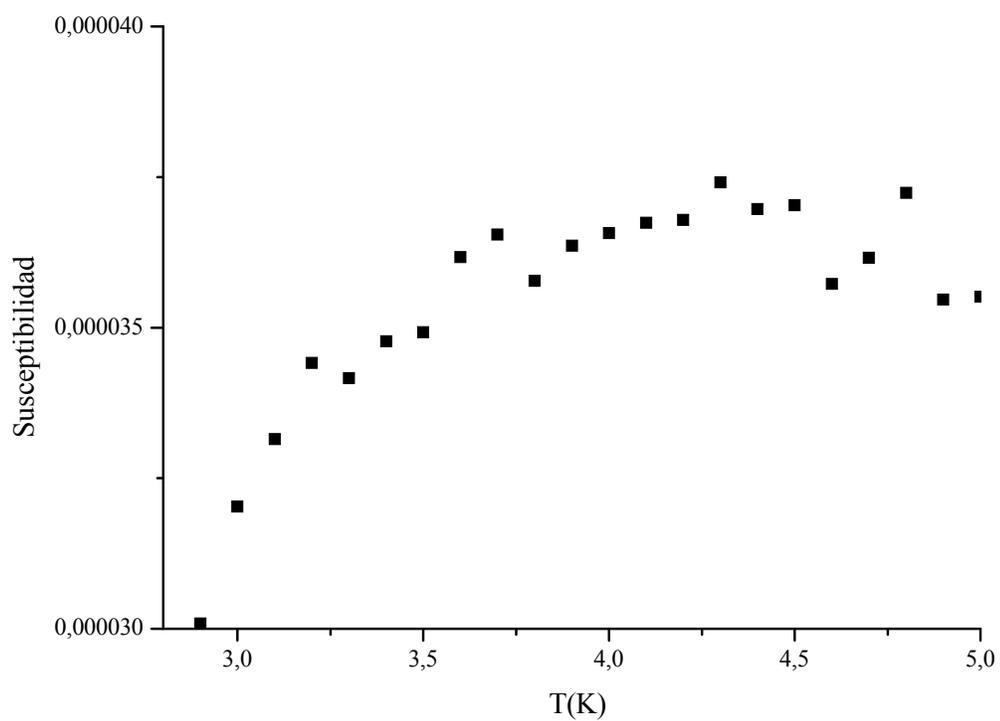


Figura 10. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,3$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

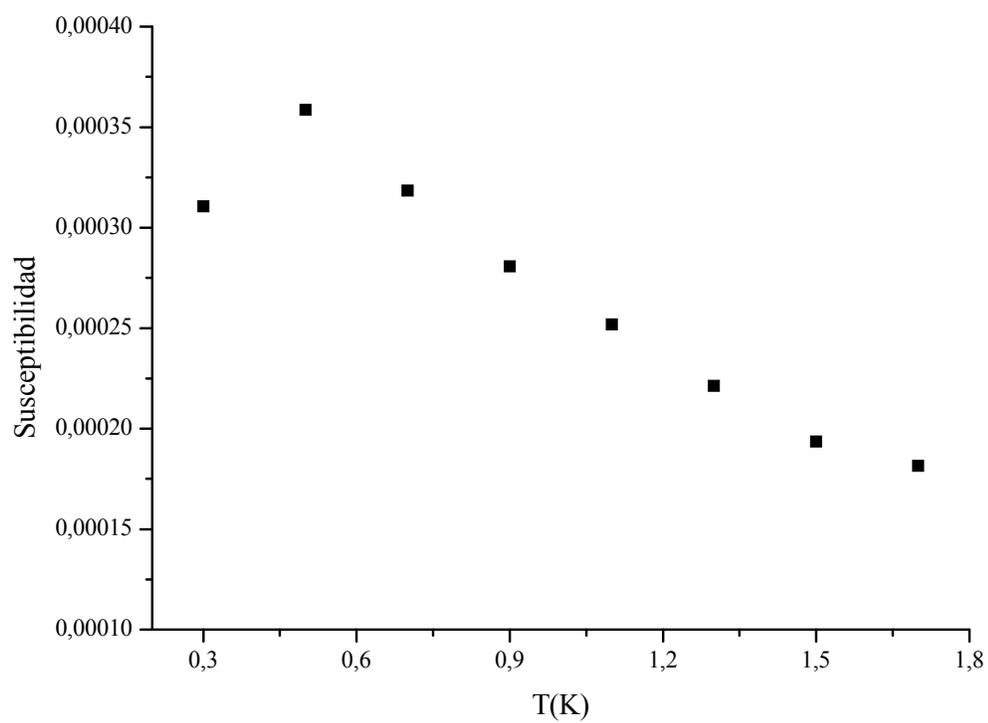


Figura 11. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,4$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

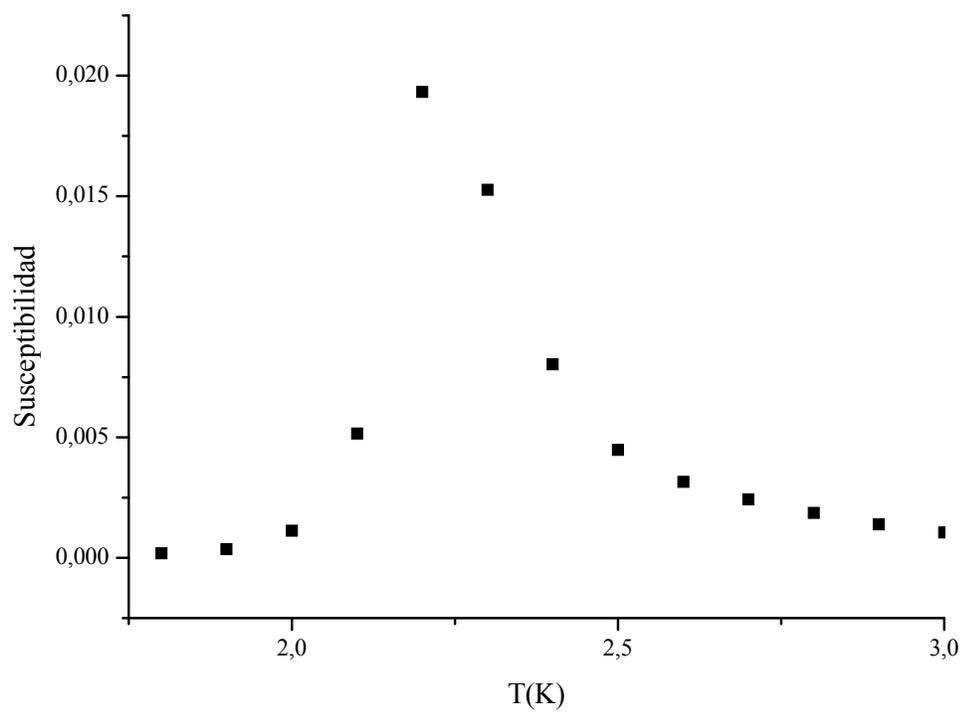


Figura 12. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,5$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

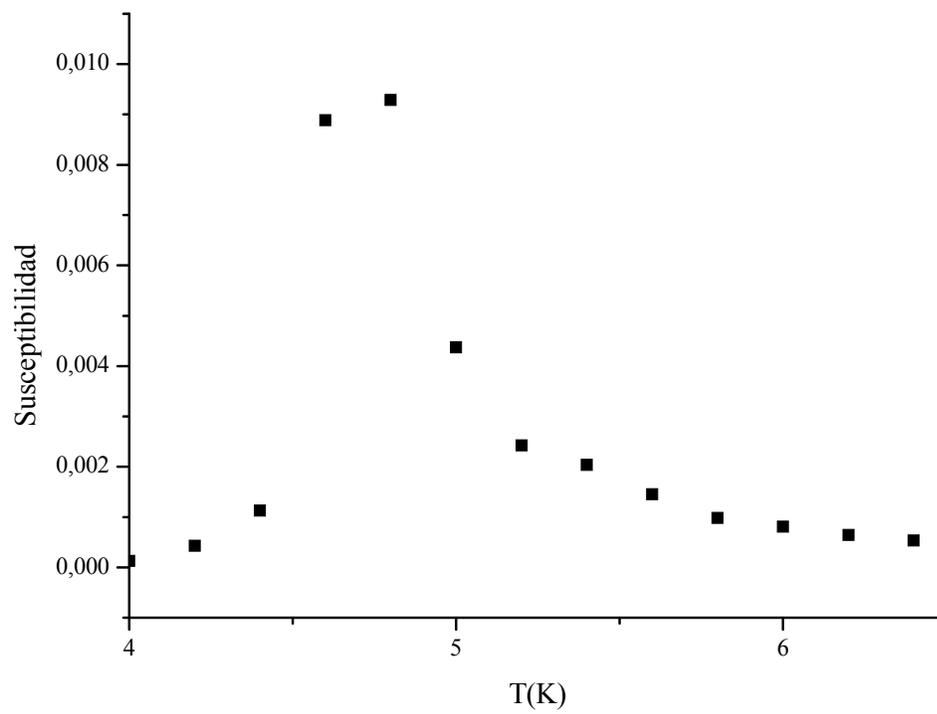


Figura 13. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,6$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

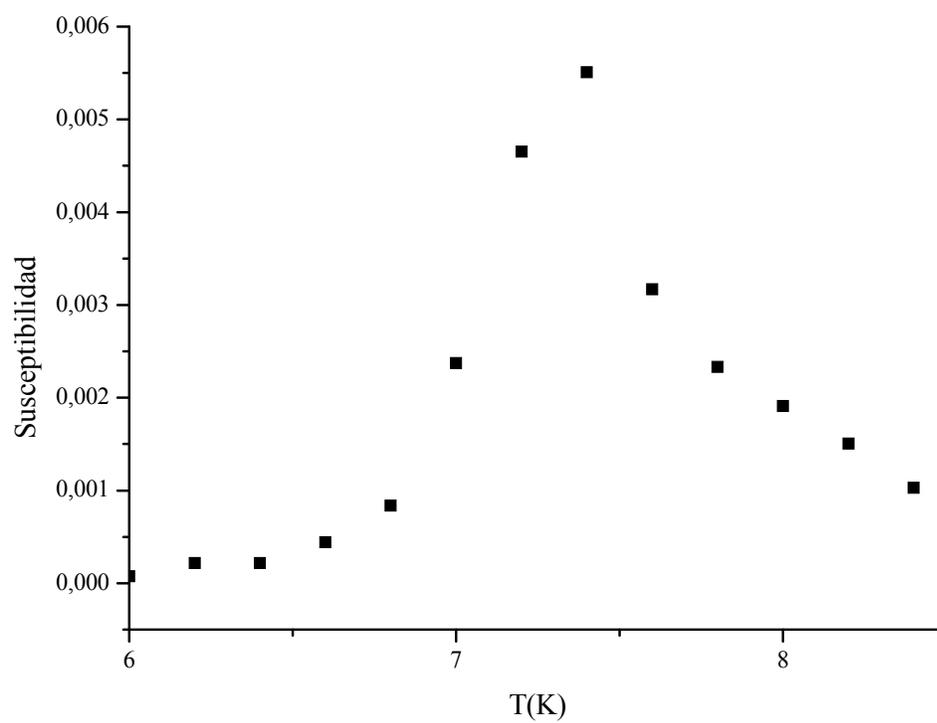


Figura 14. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,7$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

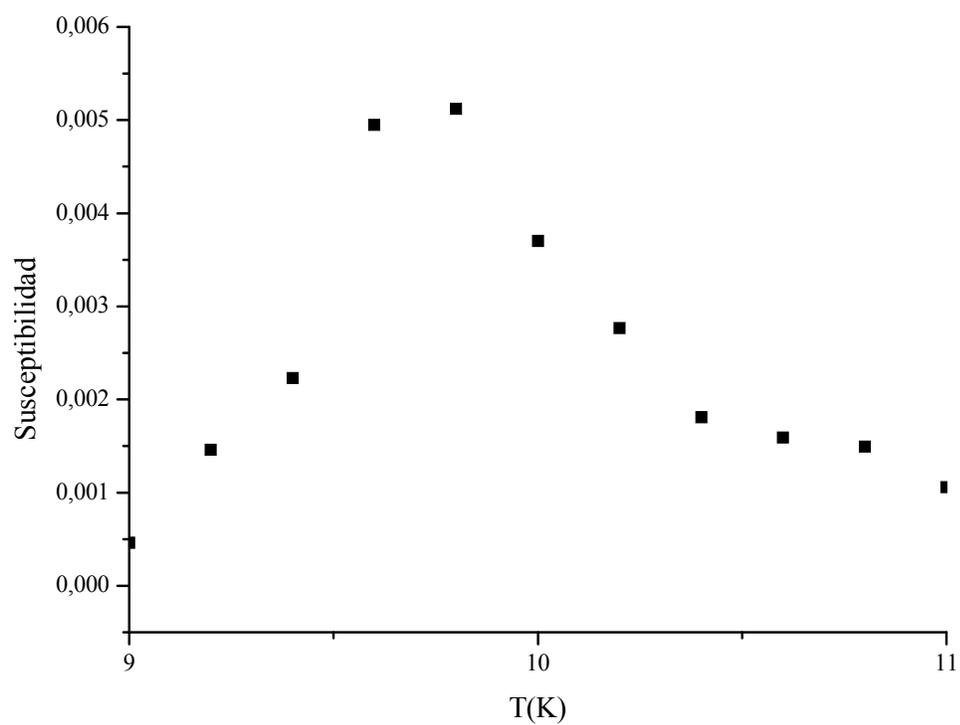


Figura 15. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,8$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

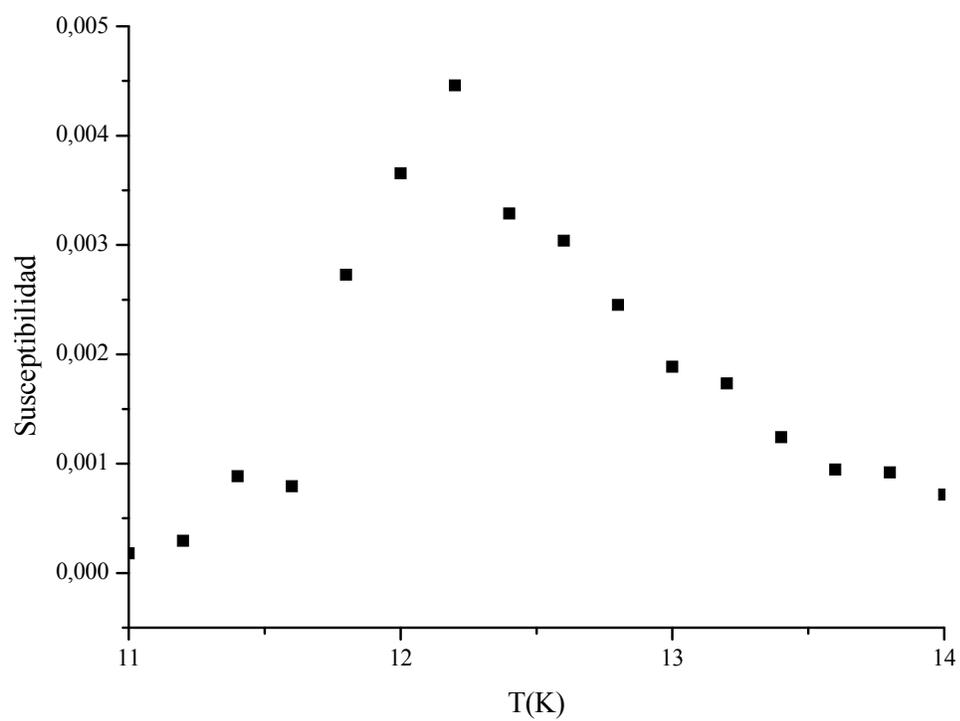


Figura 16. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,9$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

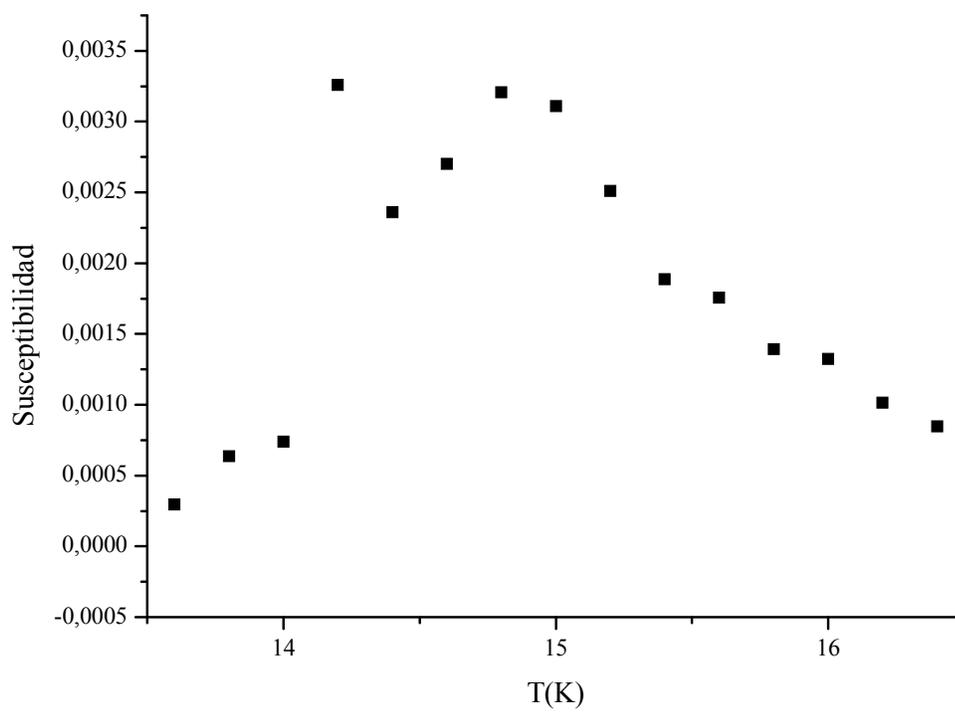


Figura 17. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 1$  en ausencia de un campo magnético externo.  $H = 0$ .

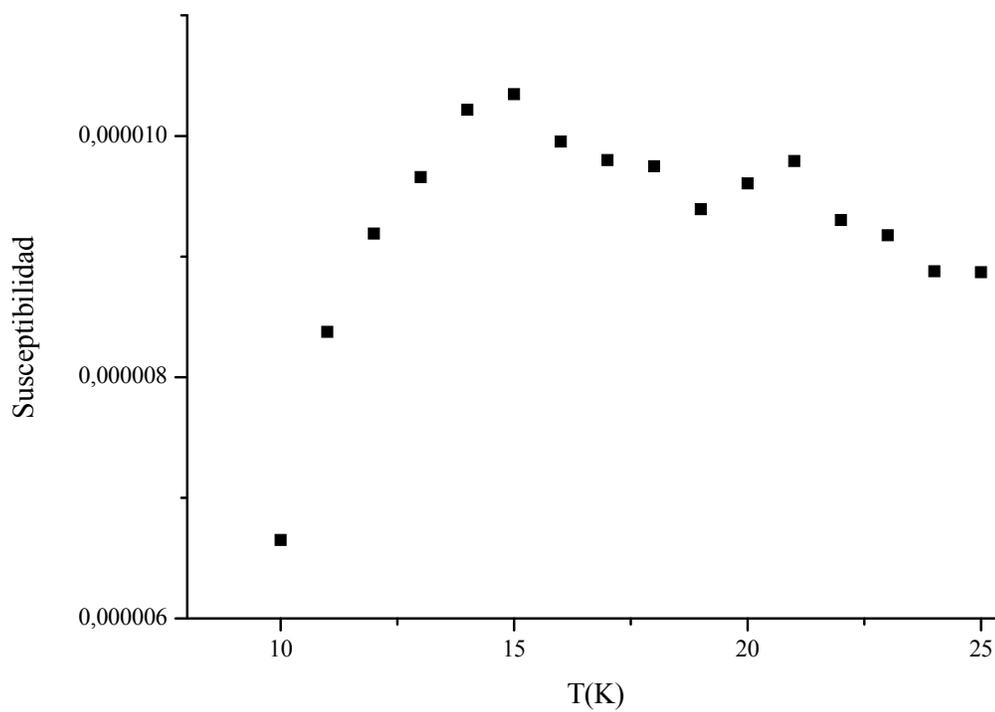


Figura 18. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0$  en presencia de un campo magnético externo.  $H = 0,2T$ .

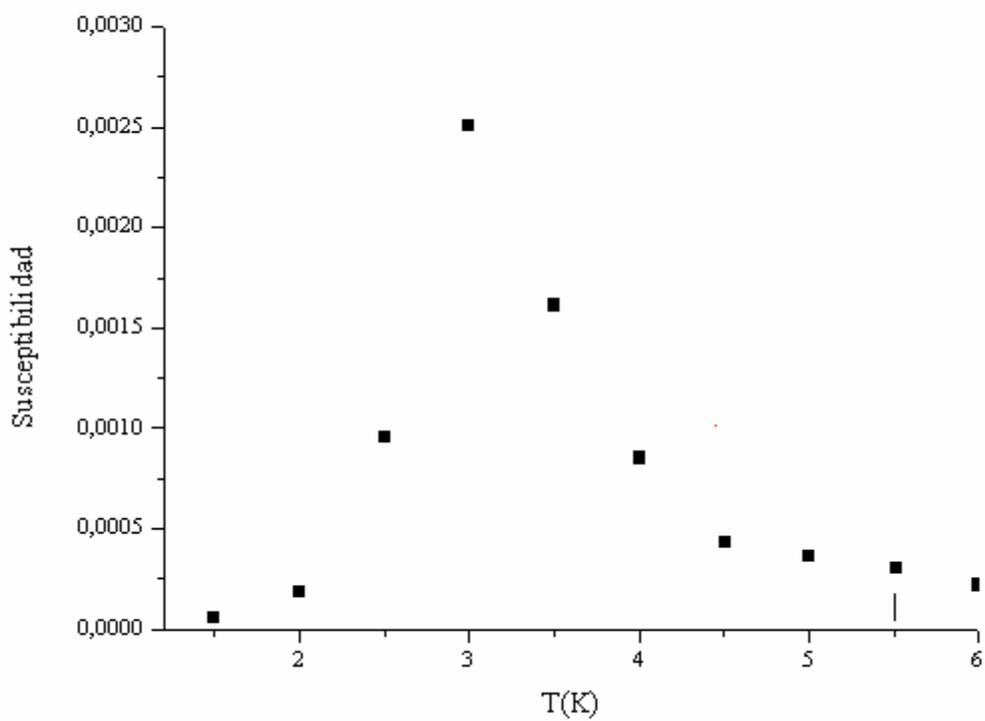


Figura 19. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 0,5$  en presencia de un campo magnético externo.  $H = 0,2T$ .

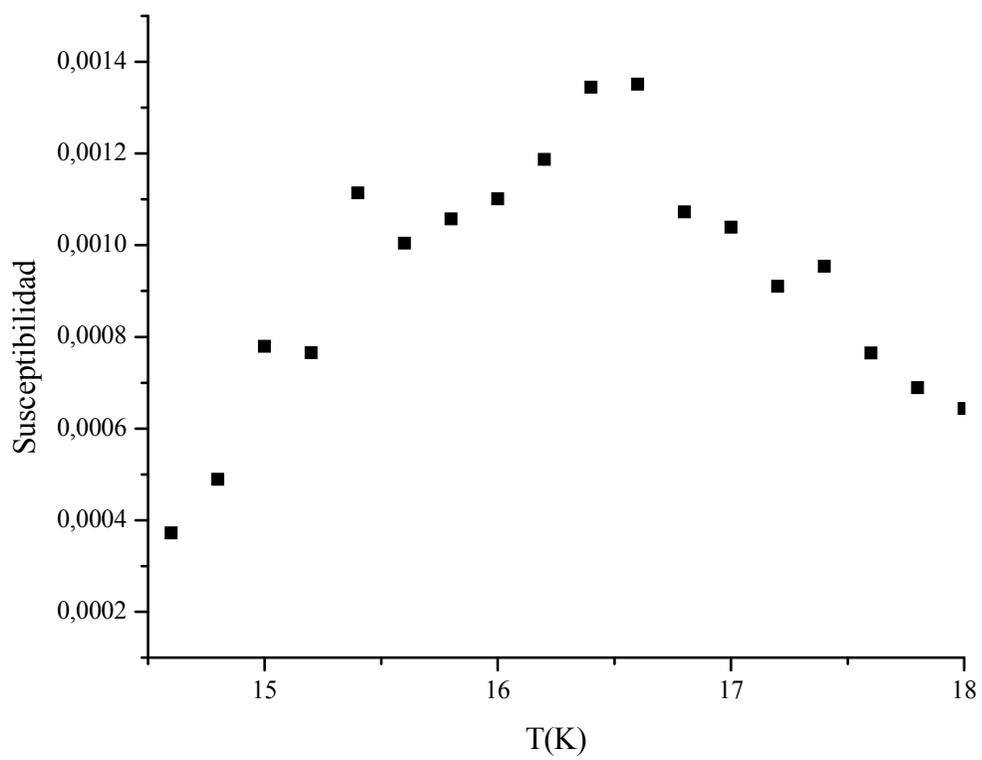


Figura 20. Gráfica de la susceptibilidad en función de la temperatura para una concentración  $x = 1$  en presencia de un campo magnético externo.  $H = 0,2T$ .

## CONCLUSIONES

El éxito del modelo se apoya en la idea de que la magnetización es producida por la interacción de los primeros vecinos para un momento localizado. Los resultados de las simulaciones, muestran que en general las variaciones en la susceptibilidad magnética cerca de la temperatura crítica cuando se crece el número de spines se deben a los Efecto de tamaño finito [32].

Los puntos más altos de la susceptibilidad corresponden a los valores de temperaturas críticas, temperaturas de transición magnética, estas temperaturas decrecen a medida que la aleación se acerca la transición de estado ferromagnético hacia antiferromagnético.

La aplicación de un campo externo puede cambiar el valor de la temperatura crítica hasta un valor máximo a partir del cual desaparecen las transiciones de fases.

## **RECOMENDACIONES**

Para futuros estudios de esta aleación será novedoso incorporar el efecto de las interacciones de los segundos vecinos en el modelo Ising 2D, así como en un modelo 3D, También deberían estudiarse otras propiedades termodinámicas y dinámicas para tener un mejor conocimiento del comportamiento de esta aleación.

## BIBLIOGRAFIA

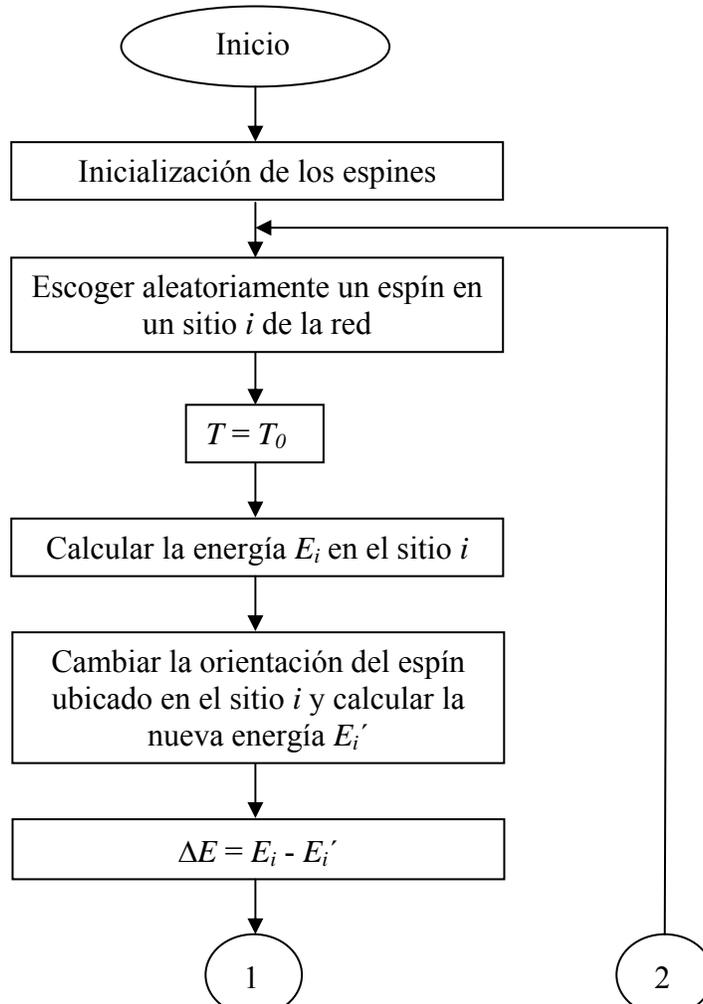
- [1]. Oliva, M. 2005. *Viscosidad magnética e interacción magnética*. Trabajo de grado. Facultad de Matemática Astronomía y Física. Universidad Nacional de Córdoba.
- [2]. Ambrose, T.; Sommer, R. L. y Chien C.L. 1997. Angular dependence of exchange coupling in ferromagnet /antiferromagnet bilayers. *Phys. Rev., B* 56: 83–86.
- [3]. Anderson, P. W. 1950. Antiferromagnetism. Theory of superexchange interaction *Phys. Rev.,* 79: 350.
- [4]. Lawes, G.; Ramirez, A.; Varma, C. y Subramanian, M. 2003. Magnetodielectric effects from spin fluctuations in isostructural ferromagnetic and antiferromagnetic systems. *Phys. Rev. let.,* 91: 2572081- 2572084.
- [5]. De Loth, P.; Cassoux, P; Daudey, J. P. Malrieu, J. P. y Am, J. 1981. Ab initio direct calculation of the singlet-triplet separation in cupric acetate hydrate dimer. *Chem. Soc.,* 103: 4007- 4016.
- [6]. Iñiguez, J. y Yildirim, T. 2005. Unusual structural tuning of magnetism in cuprate perovskites. *Phys. Rev., B*71: 180415-18418.
- [7]. Brailsford, F. 1966. Physical principle of magnetism. *Van Nostrand D.* 274. Princeton. New Jersey.
- [8]. Mendez Garcias-Hevia José Ramón. 1999. *Concepto de electromagnetismo*. Universidad de Oviedo. Servicio de publicaciones.
- [9]. Christy Agnar Pytte, R.W. 1971. *Estructura de la materia*. Editorial Reverte.
- [10]. Castiller, William D. 1985. *Introducción a la ciencia e ingeniería de los materiales* Editorial Reverte.
- [11]. Subramanian, M.A.; Ramirez, A.P. y Marshall, W.J. 1999. Structural Tuning of Ferromagnetism in a 3D Cuprate Perovskite. *Phys. Rev. Lett.,* 82: 1558.
- [12]. Spaldin, N.A. 2003. *Magnetic Materials: Fundamentals and Device Application*. Cambridge. University Press. Cambridge. 1-23, 42-88,107-122.

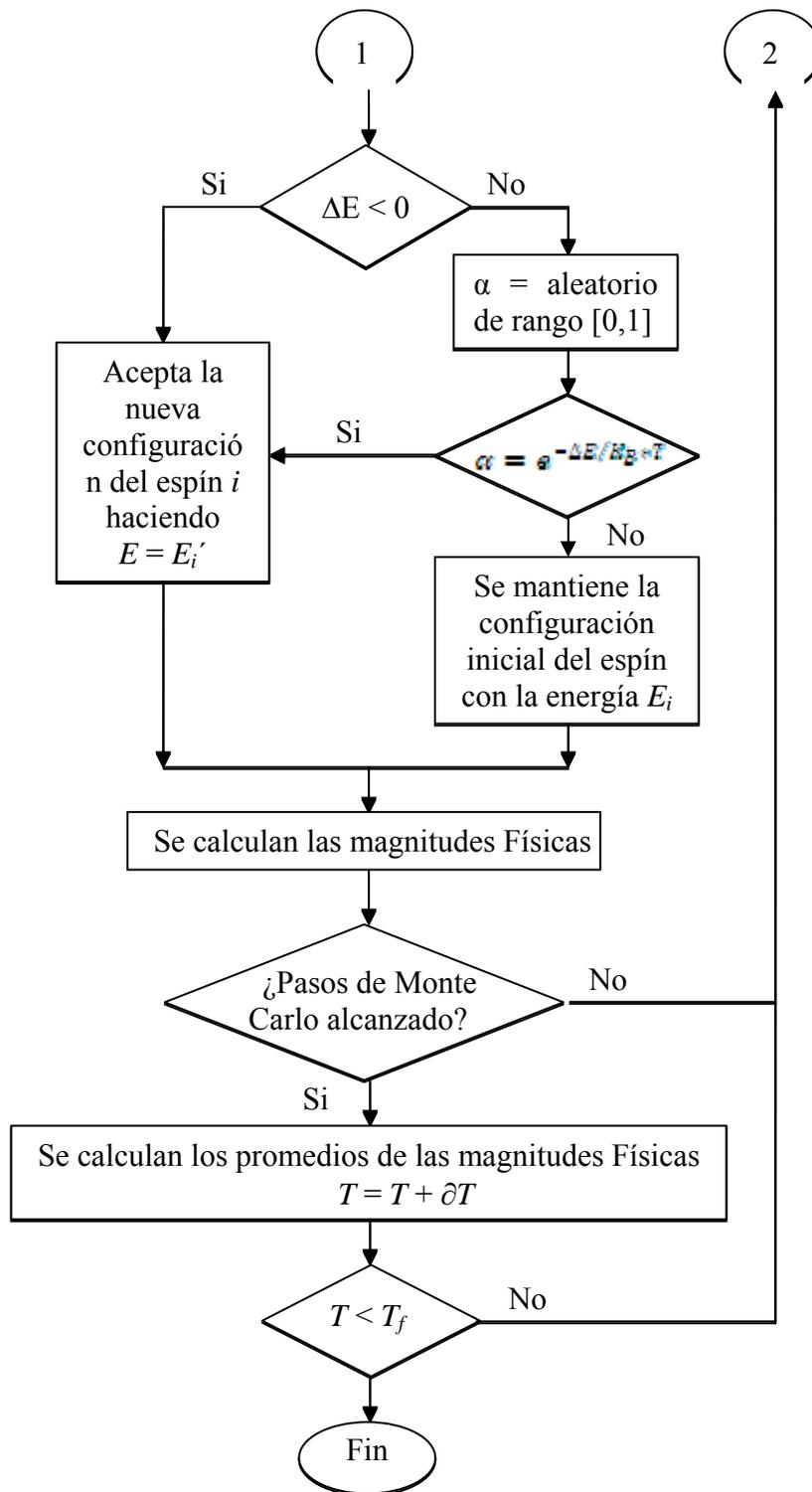
- [13]. Smith, W.F. 1993. *Fundamentos de la Ciencia e Ingeniería de Materiales*. 2da. Edición. Edit Mc Graw-Hill. 683-734.
- [14]. Feutrill, E.H.; Mc Cormick, P.G. y Street, R. 1996. Magnetization behaviour in exchange-coupled  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{14}\text{Ga}_3\text{C}_2/\alpha\text{-Fe}$ . *Appl. Phys.*, 29: 2320.
- [15]. Landau, L. D. 1930. Diamagnetismus der Metalle. *Zeitschrift für Physik*, 42: 629.
- [16]. Onsager, L. 1952. Interpretation of the de Haas-van Alphen Effect. *Phil. Mag.*, 41: 1006.
- [17]. Dingle, R. B. 1952. Some Magnetic Properties of Metals: I. General Introduction, and Properties of Large Systems of Electrons. *Proc. Roy. Soc.*, A211: 500.
- [18]. Dingle, R. B. 1952. Some Magnetic Properties of Metals: II. The Influence of Collisions on the Magnetic Behaviour of Large Systems. *Proc. Roy. Soc.*, A211: 517.
- [19]. Heerman, D. W. 1986. *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*. Springer-Verlag.
- [20]. Allen, M. P. y Tildesley, D. 1987. *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press, Oxford.
- [21]. Hansen, J. P. 1991. *An Introduction to Molecular Dynamics with an application to Glass Transition, en Computer Simulation in Materials Science*. Edited by M. Meyer and V. Pontikis, Kluwer Academic Publishers.
- [22]. Haile, J. H. 1992. *Molecular Dynamics Simulation*. J. Wiley, New York.
- [23]. Rappaport, D. E. 1996. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge Univ. Press.
- [24]. Binder, K. 1986. *Monte carlo Method in Statistical physics*. Springer, Berlin.
- [25]. Binder K. y Heermann, D. W. 1997. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction* (3<sup>rd</sup> Ed. 1997), Springer series in solid-state sciences; 80, Springer- Verlag (Berlin, 1988).
- [26]. Landau, D. P. y Binder, K. 2000. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical. Physics*. Cambridge University Press.

- [27]. Binder, K. 1997. Applications of Monte Carlo methods to statistical physics. *Rep. Prog. Phys.* 60: 487.
- [28]. Newman, M. E. J. y Barkema, G. 2000. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press.
- [29]. Cibra, B. A. 1987. An Introduction to the Ising Model. *Amer. Math. Monthly* 94: 937-959.
- [30]. Ising, E. 1925. Beitrag zur Theorie des ferromagnetismus. *Zeitschr. f. Physik*, 31: 253-258.
- [31]. Metropolis, N.; Rosenbluth, A.W.; Teller, A.H.; Rosenbluth, M.N. y Teller, E. 1953. Equation of state calculations by fast computing machines, *Journal of Chemical Physics*. 21: 1087.
- [32]. Thijssen, J. M. 1999. *Computational Physics*. Cambridge University Press.

## ANEXOS

Diagrama de flujo del Algoritmo de Metrópolis





# Hoja de Metadatos

## Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 1/5

<b>Título</b>	<b>COMPORTAMIENTO DE LA SUSCEPTIBILIDAD MAGNÉTICA EN ALEACIONES <math>Se_{1-x}Te_xCuO_3</math>.</b>
<b>Subtítulo</b>	

### Autor(es)

Apellidos y Nombres	Código CVLAC / e-mail	
<b>Pérez R. Zabdi J.</b>	<b>CVLAC</b>	<b>12.273.245</b>
	<b>e-mail</b>	<b>joiarid@hotmail.com</b>
	<b>e-mail</b>	<b>joiarid@mipunto.com</b>

### Palabras o frases claves:

<b>Susceptibilidad Magnética</b>
<b>Método de Monte Carlo</b>
<b>Ising</b>
<b>Cadena de Markov</b>

# Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de ascenso – 2/5

## Líneas y sublíneas de investigación:

Área	Subárea
Ciencias	Física

## Resumen (abstract):

Se estudió la susceptibilidad magnética de las aleaciones  $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$  usando un modelo Ising 2D, mediante la técnica de simulación de Monte Carlo, para diferentes estructuras obtenidas mediante la variación de  $x$  entre 0 y 1. Los resultados de la susceptibilidad presentaron una transición de fase caracterizada por un "pico" que corresponde a las temperaturas críticas de transición magnética. La susceptibilidad es descrita por el modelo en el rango de concentraciones estudiadas, se evidencia que estas aleaciones presentan para  $x$  menores de 0,3 transiciones ferromagnéticas. En  $x = 0,3$  observamos una combinación de comportamiento tanto ferromagnético como antiferromagnético, característico de la susceptibilidad en vidrios de espín. Para valores mayores a 0,3 se evidencia un comportamiento antiferromagnético, acorde con los resultados reportados en la literatura.

## Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 3/5

Apellidos y Nombres	ROL / Código CVLAC / e-mail	
<b>López P. Ramón Antonio</b>	ROL	CA <input type="checkbox"/> AS <input type="checkbox"/> TU <input checked="" type="checkbox"/> JU <input type="checkbox"/>
	CVLAC	<b>5.080.995</b>
	e-mail	<b>rlopez@udo.edu.ve</b>
<b>Valera, María del V</b>	ROL	CA <input type="checkbox"/> AS <input type="checkbox"/> TU <input type="checkbox"/> JU <input checked="" type="checkbox"/>
	CVLAC	<b>9.974.260</b>
	e-mail	<b>mvalera05@gmail.com</b>
<b>Guevara H., Ulises J.</b>	ROL	CA <input type="checkbox"/> AS <input type="checkbox"/> TU <input type="checkbox"/> JU <input checked="" type="checkbox"/>
	CVLAC	<b>12.658.034</b>
	e-mail	<b>ujguev@hotmail.com</b>

**Contribuidores:**

**Fecha de discusión y aprobación:**

Año      Mes      Día

2010	11	26
------	----	----

**Lenguaje: spa**

## Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 4/5

### Archivo(s):

Nombre de archivo	Tipo MIME
Tesis-PérezZ.doc	Application/word

### Alcance:

Espacial : \_\_\_\_\_(Opcional)

Temporal: \_\_\_\_\_(Opcional)

### Título o Grado asociado con el trabajo:

Licenciado en Física

Nivel Asociado con el Trabajo: Licenciado

### Área de Estudio:

Física de la materia condensada

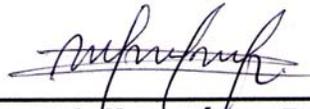
Institución(es) que garantiza(n) el Título o grado:

Universidad de Oriente

Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso  
– 5/5

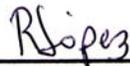
**Derechos:**

Yo, Zabdi J. Pérez R. titular de la C.I.V. 12.273.245, en mi calidad de autor del trabajo intitulado **COMPORTAMIENTO DE LA SUSCEPTIBILIDAD MAGNÉTICA EN ALEACIONES  $Se_{1-x}Te_xCuO_3$** , realizado como requisito parcial para optar al título de Licenciado en Física, autorizo a la Universidad de Oriente el libre uso de este trabajo. Los terceros deben citar la fuente para la reproducción parcial o total del texto



---

**Zabdi J. Pérez R.**  
**AUTOR**



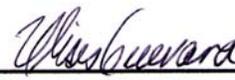
---

**Ramón A. López P.**  
**TUTOR**



---

**María del V. Valera**  
**JURADO 1**



---

**Ulises J. Guevara**  
**JURADO 2**

**POR LA COMISIÓN DE TESIS:**

