

**“SIMULACION NUMERICA DE FENOMENOS
MAGNETICOS Y ELECTRICOS
EN MANGANITAS COMPUESTAS POR TIERRAS RARAS”**

JUAN FERNANDO REINA MATERON

FACULTAD DE CIENCIAS Y ADMINISTRACIÓN
PROGRAMA DE MAESTRIA EN FISICA
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MANIZALES

2004

**“SIMULACION NUMERICA DE FENOMENOS
MAGNETICOS Y ELECTRICOS
EN MANGANITAS COMPUESTAS POR TIERRAS RARAS”**

Tesis de Maestría en Física

JUAN FERNANDO REINA MATERON

DIRECTOR DE TESIS

Andrés Rosales Rivera, PhD

FACULTAD DE CIENCIAS Y ADMINISTRACIÓN

PROGRAMA DE MAESTRIA EN FISICA

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

SEDE MANIZALES

2004

RESUMEN

Se desarrolló un nuevo método para simular la magnetorresistencia colossal en las manganitas compuestas por tierras raras mediante el modelo de Kronig-Penney-Ising. El método se basa en el cálculo exacto de la resistividad para una configuración de espines generada por un algoritmo híbrido de Monte Carlo para el modelo de Ising. Los resultados de simulación para la resistividad en función de temperatura mostraron que el máximo de la resistividad se presenta a una temperatura menor que la transición ferromagnético-paramagnético mientras que los resultados experimentales para estos compuestos muestran un pico en la resistividad a la misma temperatura crítica. Se comprobó numéricamente que esta incongruencia es propia del modelo de Kronig-Penney-Ising y no del método desarrollado en este trabajo. Los estudios de simulación anteriores basados en métodos de Monte Carlo no encuentran dicha diferencia. El método desarrollado es, dependiendo del tamaño de la red a simular, diez o más ordenes de magnitud más rápido que los algoritmos tipo Monte Carlo para la resistividad. Esta mejora dramática, permitió simular redes bidimensionales y tridimensionales de hasta 40.000 espines en computadores personales.

ABSTRACT

A new method for simulating the Kronig-Penney-Ising model for colossal magnetoresistance in manganites was developed. It is based on the exact expression for the resistivity of a spin configuration that is generated by a hybrid Monte Carlo algorithm. Resistivity vs temperature results show that the maximum of resistivity occurs at a lower temperature than the ferromagnetic-paramagnetic transition. Experimental results for these kind of compounds show a peak in the resistivity at the same critical temperature. It was proven numerically that this difference is due only to the Kronig-Penney-Ising and not to the method developed in this work. Previous simulation works based on Monte Carlo methods fail to find this difference. The new method is ten or more orders of magnitude faster than previous methods. This dramatic improvement allowed the simulation of two and three dimensional lattices of up to 40.000 spins using a personal computer.

CONTENIDO

INTRODUCCION.....	1
1. ALGUNOS FENOMENOS MAGNETICOS Y ELECTRICOS PRESENTES EN LAS MANGANITAS	3
1.1. ALGUNOS ORDENAMIENTOS MAGNETICOS.....	3
1.1.1. Antiferromagnetismo Tipo CE y Tipo A.....	4
1.2. PROPIEDADES BASICAS DE LAS MANGANITAS.....	4
1.2.1. Magnetorresistencia Colosal.....	6
1.2.2. Ordenamiento Magnético en el Compuesto $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$	8
1.2.3. Algunas Propiedades del Compuesto $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$	10
1.3. EL MECANISMO DE DOBLE INTERCAMBIO.....	15
1.4. EL ORDENAMIENTO DE CARGA.....	17
1.5. EL CONCEPTO DE POLARON DE ZENER.....	18
1.6. REFERENCIAS.....	19
2. ALGUNOS MODELOS MAGNETICOS Y DE POTENCIAL ELECTRICO.....	20
2.1. EL MODELO DE ISING.....	20
2.2. MODELO DE KRONIG-PENNEY.....	23
2.3. EL MODELO DE KRONIG-PENNEY-ISING PARA LA CMR.....	23
2.4. MODELO DE HEISENBERG CLASICO.....	25
2.5. REFERENCIAS.....	25
3. TECNICA DE SIMULACION: UN METODO HIBRIDO.....	27
3.1. EL METODO DE MONTECARLO EN SISTEMAS MAGNETICOS.....	28
3.1.1. Cálculo de algunas cantidades físicas.....	28
3.1.2. Criterio de Convergencia.....	30

3.2. ALGUNOS ALGORITMOS PARA LA SIMULACION DE MODELOS MAGNETICOS.....	30
3.2.1. Algoritmo de Metrópolis.....	31
3.2.2. Algoritmo de Wolff.....	31
3.2.3. Algoritmo del diablillo.....	32
3.3. UN METODO DE MONTE CARLO HIBRIDO.....	33
3.4. REFERENCIAS.....	35
4. UN METODO EXACTO PARA LA SIMULACION DEL MODELO DE KRONIG-PENNEY-ISING.....	36
4.1. EXPRESION ANALITICA PARA LA RESISTIVIDAD.....	36
4.2. DESCRIPCION DEL METODO.....	39
4.2.1. Algoritmo del método.....	40
4.3. REFERENCIAS.....	40
5. RESULTADOS Y DISCUSION.....	41
5.1. ESTRUCTURA GENERAL DE INTERACCIONES ENTRE VECINOS.....	41
5.2. MODELO DE ISING EN DOS DIMENSIONES.....	42
5.2.1. Resultados.....	43
5.2.2. Comparación entre varios algoritmos híbridos.....	44
5.3. MODELO DE ISING EN TRES DIMENSIONES.....	47
5.4. MODELO DE KRONIG-PENNEY-ISING.....	49
5.4.1. Magnetorresistencia Colosal.....	49
5.4.2. Caso en tres dimensiones.....	52
5.4.3. Efectos al variar algunos parámetros del sistema.....	52
5.4.4. Efectos de Tamaño Finito.....	54
5.4.5. Comparación Numérica entre la solución de Monte Carlo y la exacta para la magnetorresistencia.....	55
5.4.5.1. Solución de Monte Carlo.....	56
5.4.5.2. Solución Exacta.....	57
5.4.5.3. Comparación entre ambas soluciones.....	58
5.4.6. Discrepancia entre T_c y la temperatura del máximo de resistividad.....	60
5.4.6.1. Prueba numérica.....	61
5.5. MODELO DE HEISENBERG FRUSTRADO.....	65

5.6. REFERENCIAS.....	66
6. CONCLUSIONES.....	68
7. PERSPECTIVAS.....	70
A. IDENTIFICACION DE UN PROBLEMA INTRATABLE EN LA FISICA. EL MODELO DE ISING EN TRES DIMENSIONES.....	71
B. INTERACCIONES DE INTERCAMBIO.....	72
C. ALGUNOS TRABAJOS PREVIOS.....	74

INDICE DE FIGURAS

Fig. 1.1 Algunos tipos de ordenamientos magnéticos.....	3
Fig. 1.2 Ordenamiento AFM Tipo A y Tipo CE en manganitas de tierras raras	4
Fig. 1.3 Organización de los iones en la estructura perovskita de las manganitas.....	5
Fig. 1.4 Los cinco orbitales d.....	6
Fig. 1.5. Resistividad vs temperatura para el compuesto $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ para un campo magnético de 0 y 5T con una temperatura crítica de 250K.....	8
Fig. 1.6 Magnetorresistencia en función del campo magnético para varias manganitas compuestas por tierras raras $\text{La}_{1-x}\text{Mg}_x\text{MnO}_3$, $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$, $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$	8
Fig. 1.7 Diagrama de fase temperatura vs x del $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$	9
Fig. 1.8 Resistividad vs temperatura a campo cero para varias muestras de $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$	11
Fig. 1.9 Resistividad vs Campo magnético para $\text{Pr}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{MnO}_3$ a varias temperaturas.....	12
Fig. 1.10 Susceptibilidad DC contra temperatura para $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$, con $x = 0.3, 0.4, 0.5$ para un campo magnético de 1 kOe y 120 kOe.....	13
Fig. 1.11 Magnetización vs campo aplicado en $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ con $x = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ para $T = 10 \text{ K}$	14
Fig. 1.12 El mecanismo de doble intercambio. a) Favorecido: los iones vecinos están alineados ferromagnéticamente b) No favorecido: los iones vecinos están alineados antiferromagnéticamente.....	16
Fig. 1.13. Tres tipos de superestructuras magnéticas/orbitales. a) Fase CE b) Fase Ortogonal c) Fase 120° . La dirección de los espines está indicada por las flechas.....	18
Fig. 2.1 Magnetización espontánea exacta para el modelo de Ising en dos dimensiones para una red cuadrada.....	22
Fig.2.2 Potencial periódico en el modelo de Kronig-Penney.....	23
Fig. 4.1 Transmisión de un electrón a lo largo del eje x en una red bidimensional tipo Ising. .	37
Fig. 5.1 Estructura general de interacciones entre vecinos para dos dimensiones.....	42
Fig. 5.2 a) Red triangular b) Estructura de interacciones entre vecinos para J_4 nulo c) Red	

cuadrada equivalente a una red triangular.....	42
Fig. 5.3 Magnetización por espín para el modelo de Ising en dos dimensiones para varios valores de campo magnético.....	43
Fig. 5.4 Susceptibilidad por espín para el modelo de Ising en dos dimensiones.....	44
Fig. 5.5 Valor ajustado de J mediante la magnetización para varios algoritmos.....	45
Fig. 5.6 Tiempo de simulación acumulado al bajar la temperatura para varios algoritmos híbridos.....	46
Fig. 5.7 Magnetización por espín en función de la temperatura para una red cuadrada de 100x100 espines.....	47
Fig. 5.8 Magnetización por espín para el modelo de Ising en tres dimensiones.....	48
Fig. 5.9 Energía por espín para el modelo de Ising en tres dimensiones.....	48
Fig. 5.10 Susceptibilidad por espín en una red tridimensional con $J = J_1 = J_2 = 3.5 \text{ meV}$	49
Fig. 5.11 Resistividad en función de temperatura para varios valores de campo magnético....	50
Fig. 5.12 Magnetización y Resistividad en función de temperatura.....	51
Fig. 5.13 Magnetorresistencia en función del campo aplicado H.....	51
Fig. 5.14 Resistividad en función de temperatura para varios valores de campo en una red tridimensional.....	52
Fig. 5.15 Resistividad en función de la temperatura para varios valores de γ menores a 4.....	53
Fig. 5.16 Resistividad en función de la temperatura para varios valores de γ mayores a 4.....	53
Fig. 5.17 Efecto del tamaño de la red en la resistividad en función de la temperatura.....	54
Fig. 5.18 Proceso de magnetotransporte en una red unidimensional de (L_1+L_2) espines.....	55
Fig. 5.19 Solución de Monte Carlo para τ en función del tamaño de cluster L2 para varios valores de γ	56
Fig. 5.20 Tiempo de simulación en función de L2 para varios valores de γ	57
Fig. 5.21 Solución exacta para τ en función del tamaño de cluster L2.....	58
Fig. 5.22 Tiempo de simulación en función de L2 para varios valores de γ	58
Fig. 5.23 Superposición entre la solución de Monte Carlo (MC) y la Exacta para τ	59
Fig. 5.24 Resistividad en función de la temperatura para varios valores de campo. La simulación de la resistividad se obtuvo mediante un método de Monte Carlo.....	60
Fig. 5.25 Tamaño promedio de las barreras de potencial y resistividad estimada para una red cuadrada tipo Ising.....	61

Fig. 5.26 Tamaño promedio de las barreras de potencial y configuración de la red para varias temperaturas.....	62
Fig. 5.27 Resistividad en función de los pasos de Monte Carlo para el caso 1.....	63
Fig. 5.28 Resistividad en función de los pasos de Monte Carlo para el caso 2.....	64
Fig. 5.29 Resistividad en función de Temperatura para varios valores de γ	64
Fig. 5.30 Resistividad en función de los pasos de Monte Carlo para los casos 1 y 2.....	65
Fig. 5.31 Configuraciones de Espines para el modelo de Heisenberg frustrado.....	66

INTRODUCCION

Existe una intensa investigación mundial orientada a elucidar los mecanismos responsables de las propiedades magnéticas y de transporte eléctrico presentes en las manganitas dopadas del tipo $A_{1-x}B_xMnO_3$, en donde A es un ion trivalente y B un ion divalente. Fenómenos como la magnetorresistencia colosal (CMR), que consiste en la variación de la resistividad en varios órdenes de magnitud con el campo magnético aplicado, el ordenamiento de carga, y los diferentes ordenamientos magnéticos que se presentan en esta familia de compuestos, como ferromagnetismo (FM), antiferromagnetismo (AFM), AFM tipo CE, AFM tipo A, AFM decantado, entre otros, hacen que estos materiales sean muy interesantes para su estudio desde el punto de vista de ciencia básica y aplicada. Se han propuesto varios modelos para describir el fenómeno de magnetorresistencia colosal basados en la idea del polarón magnético, como el doble intercambio, sin embargo dicho modelo ha sido muy criticado recientemente debido a que no reproduce las propiedades cualitativas de la CMR para algunos materiales como el $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ para todo el rango de x . Recientemente se ha propuesto un modelo alternativo, el modelo de Kronig-Penney-Ising para CMR, basado en la idea de que la correlación entre los momentos magnéticos es la causa principal del comportamiento de la CMR en función de campo y temperatura. Dicho modelo ha sido simulado para redes bidimensionales de hasta 10.000 espines por R. Lillis mediante computadores robustos diseñados específicamente para realizar cálculos intensos. La sencillez de este modelo y su efectividad al describir el comportamiento cualitativo de la CMR, así como los diferentes enfoques mencionados anteriormente, motivaron el presente trabajo en el que se desarrolló un método mucho más eficiente basado en el cálculo de la resistividad mediante una expresión analítica en oposición a los métodos anteriores basados únicamente en técnicas de Monte Carlo, que permite simular en menos tiempo de computación y de forma más precisa el modelo de Kronig-Penney-Ising en computadores personales para redes bidimensionales y tridimensionales de hasta 40.000 espines.

Esta tesis está organizada en seis capítulos. El capítulo primero describe algunos fenómenos magnéticos y eléctricos en las manganitas, además de tratar algunos de los modelos más importantes en el desarrollo de este trabajo. En el capítulo segundo se describen algunos modelos magnéticos y se presentan las expresiones analíticas para el modelo de Ising en dos dimensiones. En el capítulo tercero se muestran tres algoritmos de simulación para los modelos magnéticos, también se explica el algoritmo híbrido usado para las simulaciones de este trabajo. El desarrollo de la expresión exacta para la resistividad según el modelo de Kronig-Penney-Ising, y de un nuevo método basado en esta expresión se realiza en el capítulo cuarto. En el capítulo quinto se presentan los resultados para el modelo de Ising en dos y tres dimensiones y para el modelo de Kronig-Penney-Ising, se hace una discusión acerca de los resultados obtenidos y de la confiabilidad del método. En el siguiente capítulo se presentan las conclusiones obtenidas a partir de los resultados de este trabajo, seguidas de las perspectivas de investigación relacionadas con el tema de las manganitas y la simulación numérica.

1. ALGUNOS FENOMENOS MAGNETICOS Y ELECTRICOS PRESENTES EN LAS MANGANITAS

En este capítulo se hace una breve descripción de algunos fenómenos eléctricos y magnéticos y de algunos modelos propuestos con el fin de dar a conocer la complejidad presente en los compuestos denominados manganitas, cuya composición general es $A_{1-x}B_xMnO_3$, en donde A es una tierra rara trivalente o un catión de Bi^{2+} , y B es un alcalino divalente o catión Pb^{2+} .

1.1. ALGUNOS ORDENAMIENTOS MAGNETICOS

Dependiendo del origen microscópico de la magnetización y de las interacciones internas, los materiales se clasifican comúnmente en una de las siguientes categorías, entre otras: diamagnéticos, paramagnéticos (PM), ferromagnéticos (FM), ferrimagnéticos, antiferromagnéticos (AFM). En la Fig. 1.1 se ilustra el ordenamiento de los momentos magnéticos para los ordenamientos PM, FM, AFM, ferrimagnético y antiferromagnético volcado.

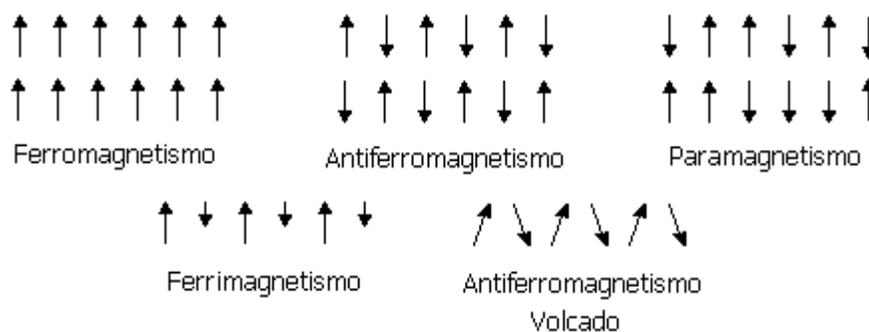


Fig. 1.1 Algunos tipos de ordenamientos magnéticos

En el caso de las manganitas el ordenamiento de los momentos magnéticos es complejo y en ocasiones puede involucrar la coexistencia de algunos de los ordenamientos mencionados anteriormente. Entre los más importantes se encuentra el antiferromagnetismo tipo CE y tipo A que se describen a continuación.

1.1.1. Antiferromagnetismo Tipo CE y Tipo A

Las manganitas de tierras raras pueden ordenarse antiferromagnéticamente con ordenamiento tipo CE o tipo A a temperaturas bajas, pero el primero sólo ocurre en materiales ordenados por carga, en donde los electrones e_g están localizados. El tipo de ordenamiento CE se caracteriza por el ordenamiento alternado de iones de Mn^{3+} y Mn^{4+} . El ordenamiento de espines en el plano ab es complejo y se ordenan antiferromagnéticamente a lo largo del eje c (ver Fig. 1.2). En el ordenamiento tipo A, los espines se ordenan ferromagnéticamente en el plano ab (con los momentos apuntando en la dirección del eje a) y estos planos se apilan antiferromagnéticamente a lo largo del eje c . La Fig. 1.2 ilustra las características de los ordenamientos tipo CE y tipo A para manganitas de tierras raras con $x = 0.5$.

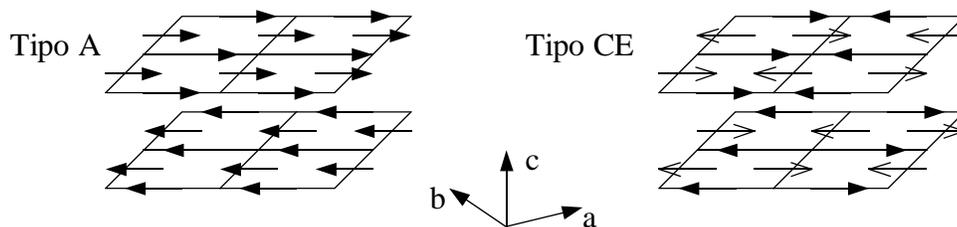


Fig. 1.2 Ordenamiento AFM Tipo A y Tipo CE en manganitas de tierras raras

1.2. PROPIEDADES BASICAS DE LAS MANGANITAS

El campo de las manganitas comenzó con el trabajo de Jonker y van Santen en 1950 quienes reportaron la existencia de ferromagnetismo en cristales mixtos $LaMnO_3$, $CaMnO_3$, $LaMnO_3-BaMnO_3$. La fórmula química general para los óxidos de manganeso es $A_{1-x}B_xMnO_3$, en donde A es una tierra rara trivalente o un catión de Bi^{2+} , y B es un alcalino divalente o catión Pb^{2+} . El oxígeno se encuentra en un estado O^{2-} , y la fracción relativa de Mn^{4+} y Mn^{3+} se regula por x . La estructura perovskita en la que cristalizan estos materiales se ilustra en la Fig. 1.3. Jonker y

van Santen adoptaron la terminología *manganitas*, aunque el término no es estrictamente correcto pues debería en principio aplicarse solo al compuesto con 100% Mn^{4+} .

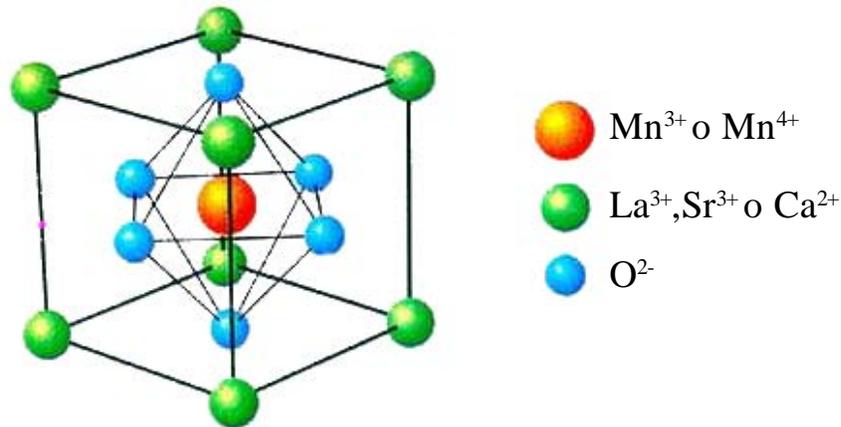
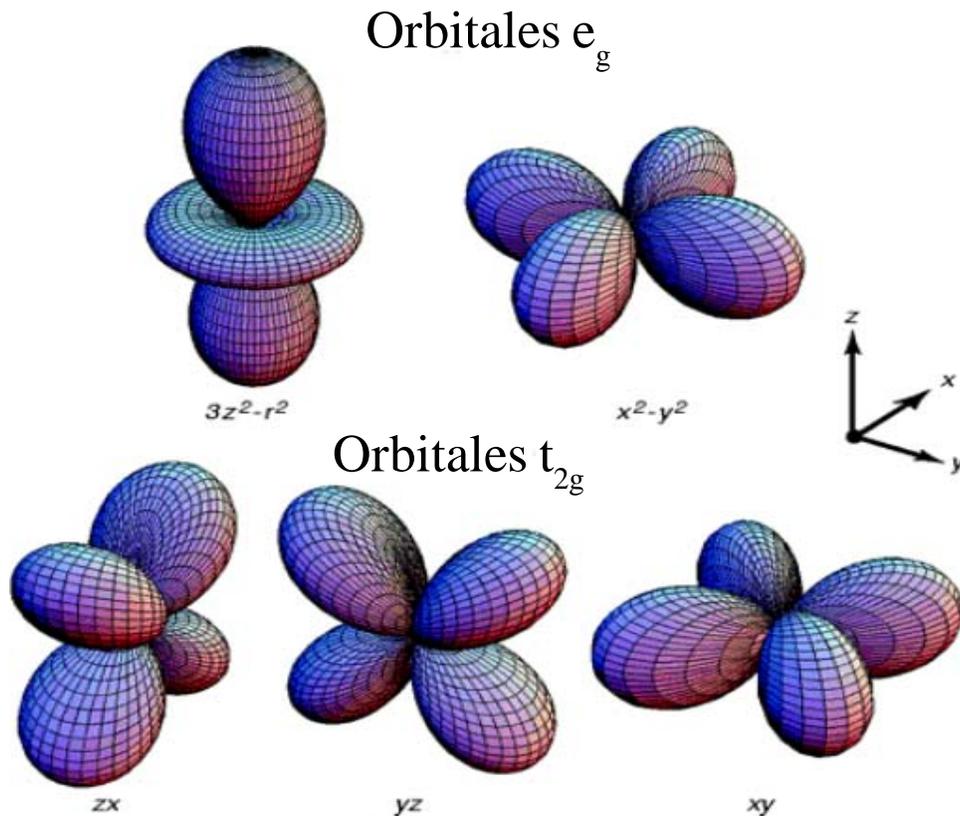


Fig. 1.3 Organización de los iones en la estructura perovskita de las manganitas

El estado de oxidación del Mn es responsable de las propiedades electrónicas de las manganitas. Los estados Mn^{4+} y Mn^{3+} de configuración electrónica $3d^3$ y $3d^4$ respectivamente, exhiben estados degenerados con dos orbitales e_g ($3z^2-r^2$, x^2-y^2) y tres orbitales t_{2g} (zx , yz , xy). En la Fig. 1.4 se representan los orbitales d en el campo cristalino cúbico exhibiendo esta degeneración quintuple.



1.2.1. Magnetorresistencia Colosal

El efecto conseguido al sustituir un ion divalente alcalino como el Ca por una fracción de iones lantánidos ($A_{1-x}B_xMnO_3$), es la creación de una banda de conducción que permite que el material se torne conductor a ciertas temperaturas y valores de x . En la región $x = 0.2$ a $x = 0.5$ el material se ordena ferromagnético a temperaturas menores a la temperatura de Curie. La transición de paramagnetismo a ferromagnetismo se encuentra acompañada de una caída rápida en la resistividad ρ , causada por la transición de un estado de desorden a otro de orden. El desorden hace que los portadores de carga con diferentes espines se choquen entre sí, incrementando ρ . Similarmente, si se aplica un campo magnético a la muestra, esto incrementará el orden, y reducirá la resistividad. La cantidad en la cual la resistividad se reduce se denomina *magnetorresistencia*. Está dada por:

$$\Delta \rho = \frac{\rho_h - \rho_o}{\rho_o} \quad (1.1)$$

en donde ρ_H y ρ_o son las resistividades con y sin campo aplicado respectivamente. En los materiales ferromagnéticos normales es de solo un pequeño porcentaje pero en estas manganitas perovskitas puede alcanzar cerca de 100% para campos altos, de aquí el término magnetorresistencia *colosal*.

La resistividad de algunos materiales con estructura perovskita presenta un pico enorme a alguna temperatura T_{M-A} relacionada con una transición metal-aislante (M-A). Dicha transición esta acompañada a menudo por una transición paramagnética-ferromagnética de segundo orden a cierta temperatura T_c . En la presencia de un campo magnético (H), la resistividad $\rho(T,H)$ disminuye considerablemente cerca de la temperatura en la cual $\rho(T,0)$ presenta su máximo. La Fig.1.5 ilustra este comportamiento típico para el compuesto $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ [1]. Otra característica importante presente en algunas manganitas como $La_{1-x}Mg_xMnO_3$, $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ y $Pr_{1-x}Sr_xMnO_3$ [2] es el incremento logarítmico de la magnetorresistencia con el campo magnético, como se ilustra en la Fig. 1.6.

Diferentes teorías han sido propuestas para explicar el fenómeno de magnetorresistencia colosal, pero su comportamiento exacto para temperatura y campo magnético aun no ha sido comprendido satisfactoriamente.

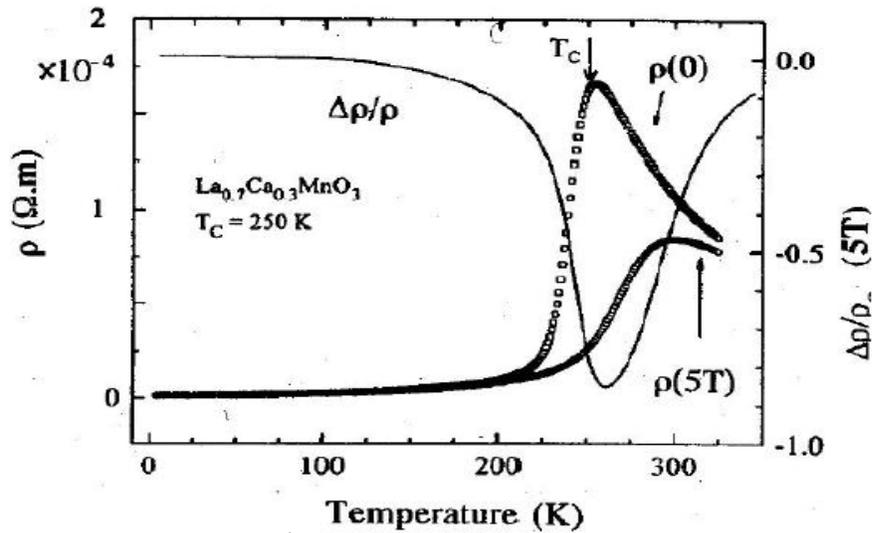


Fig. 1.5. Resistividad vs temperatura para el compuesto $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ para un campo magnético de 0 y 5T con una temperatura crítica de 250K. Tomada de Ref. [1]

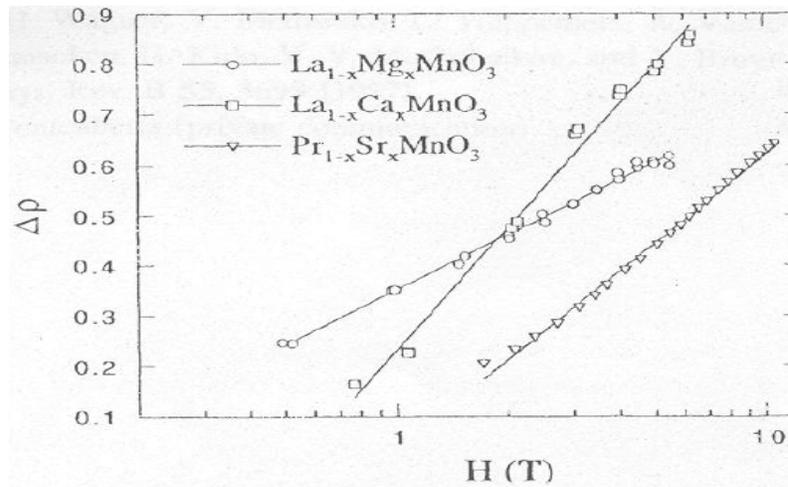


Fig. 1.6 Magnetoresistencia en función del campo magnético para varias manganitas compuestas por tierras raras $La_{1-x}Mg_xMnO_3$, $La_{1-x}Ca_xMnO_3$, $Pr_{1-x}Sr_xMnO_3$ [2].

1.2.2. Ordenamiento Magnético en el Compuesto $La_{1-x}Ca_xMnO_3$

Una manganita de lantano no dopada corresponde a la composición iónica $La^{+3}Mn^{+3}O_3$. La configuración de un átomo neutro de Mn es $3d^54s^2$, esto significa que un Mn^{+3} ionizado tiene 4 electrones-d que serán responsables de sus propiedades electrónicas. Al sustituir todos los átomos trivalentes de tierras raras La por un metal bivalente como el Ca, se obtiene el siguiente compuesto $Ca^{+3}Mn^{+4}O_3$ con la valencia del Mn +4. Así, el ion Mn en el compuesto

CaMnO_3 , tendrá 3 electrones-d. Este último compuesto también cristaliza en la estructura tipo perovskita. Ambas perovskitas, LaMnO_3 y CaMnO_3 son aislantes antiferromagnéticos con n planos ferromagnéticos en los que la dirección de los espines se alterna. Para el compuesto $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($0 < x < 1$), los iones de Mn son de valencia mixta, y el número promedio de electrones-d en el lugar del Mn es $4-x$. Algo sorprendente es que aunque las manganitas puras de La y Ca son aislantes antiferromagnéticos, la composición intermedia $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ exhibe un fuerte ferromagnetismo sobre un amplio rango de temperatura y concentración de portadores x .

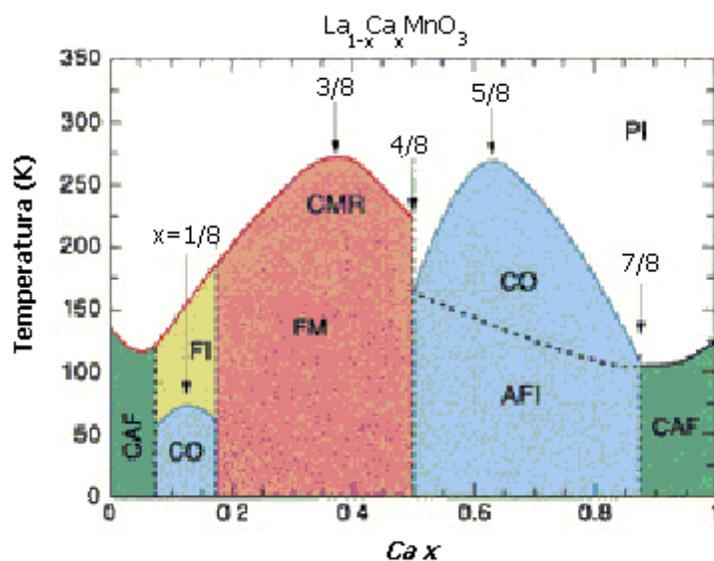


Fig. 1.7 Diagrama de fase temperatura vs x del $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

El compuesto $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ exhibe una variedad de fases cuando se varía la concentración de portadores x , y la temperatura T . Estas fases se caracterizan por diferentes propiedades magnéticas y de transporte. En la Fig. 1.7 se muestra el diagrama de fases [3] en el plano temperatura vs nivel de dopaje para este sistema. A $x = 0$, el LaMnO_3 es un aislante, lo que significa que la resistividad aumenta cuando la temperatura disminuye en el rango entero de temperatura. El compuesto exhibe una transición magnética paramagnética-aislante antiferromagnética (AFMI) a $T_N = 141\text{K}$. Para $0 < x < 0.2$, el compuesto se mantiene en su estado aislante, pero el orden magnético cambia en una forma complicada mostrando cruzamiento de antiferromagnetismo decantado (CAF) por ferromagnetismo aislante (FMI). A

$x \cong 0.2$, se torna FM metálico. Estas transformaciones se muestran con las líneas punteadas en la Fig. 1.7. En la región $0.2 < x < 0.5$, el compuesto es FM metálico a $T < T_c$, donde T_c es la temperatura de Curie mostrada por la línea sólida. Para $x > 0.5$, el material primero pasa por una transición paramagnética-CO al disminuir la temperatura, luego la estructura se torna AFM y presenta ordenamiento por carga a menores temperaturas. Finalmente, a $x \cong 1$, el compuesto es una manganita de Ca pura, la cual exhibe un comportamiento aislante con el ordenamiento AFM a $T < T_N$ ($T_N \cong 131$ K) con un tipo diferente de ordenamiento AFM que para la manganita de La pura.

1.2.3. Algunas Propiedades del Compuesto $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

Entre las manganitas, el $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ es único, mostrando comportamiento aislante sobre todo el rango de concentraciones, x , debido a su banda electrónica estrecha e_g . El estado fundamental del $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ con $x = 0.3-0.5$ es AFM-aislante ordenado por carga. El ordenamiento en el espacio real de un átomo de Mn^{3+} por uno de Mn^{4+} ocurre a $T_{CO} \cong 230$ K y para $T < T_N$ ($T_N \cong 170$ K) los momentos locales de espines se ordenan antiferromagnéticamente, mientras que la interacción ferromagnética de doble intercambio entre los iones de Mn está bloqueada por dicho ordenamiento de carga. Sin embargo, se ha reportado [4] que el material puede ser llevado a un estado ferromagnético mediante la aplicación de un campo magnético suficientemente fuerte, dando lugar a una transición de fase AFM-FM (metamagnética) también con una drástica disminución de la resistividad en más de diez órdenes de magnitud. El $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ cristaliza en la forma de una perovskita desordenada ortorrómbicamente en todo su rango de composición ($0 \leq x \leq 1$) y presenta un diagrama magnético de fase complejo [5]. El PrMnO_3 se ordena antiferromagnéticamente a $T_N = 91$ K aunque la naturaleza del orden magnético parece estar asociado con la estequiometría del oxígeno. Al adicionar Ca aparece un orden ferromagnético para $0 < x < 0.3$. Para $x = 0.2$, la temperatura de Curie, es $T_c = 130$ K. Para $x = 0.3$, en el cual el compuesto se sitúa en el borde entre dos tipos cristalográficos, la naturaleza del ordenamiento magnético es menos

clara. Ha sido sugerido que un tipo de ordenamiento AFM con estructura CE a $T_N \cong 130\text{K}$ se obtiene por medio de una estructura de ferromagnetismo volcado coexistiendo con un ordenamiento antiferromagnético tipo CE en $T_{CA} \cong 115\text{ K}$ [6]. Para $0.4 \leq x \leq 1.0$, el ordenamiento está dentro de un número posible de estructuras AFM. Para $0.4 \leq x \leq 0.5$, el material se ordena en una estructura AFM volcada para temperaturas cercanas a $T_N \cong 170\text{ K}$. Para $x = 1$, se tiene CaMnO_3 con ordenamiento AFM tipo G con un T_N de 110K .

Se ha reportado magnetorresistencia gigante negativa para el $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ con $x = 0.3$ [7]. Se ha encontrado magnetorresistencia colosal en este compuesto para $x = 0.3$, en donde pequeñas cantidades de Ca han sido reemplazadas por Sr [8]. Para $x = 0.4$ también han sido encontradas propiedades de transporte dependientes del campo magnético. Existe una fuerte correlación entre las propiedades magnéticas y de transporte de este material, con la manifestación del ferromagnetismo coincidiendo con la aparición de un estado de alta conductividad eléctrica [9]. Un estudio reciente de difracción de neutrones para $x = 0.3$, ha mostrado que la aplicación de un campo magnético destruye el ordenamiento AFM y el ordenamiento por carga, con la aparición de un estado FM metálico. Las transiciones estructurales y de CO cerca de $T = 250\text{ K}$, se desacoplan de un ordenamiento AFM el cual ocurre alrededor de $T = 170\text{ K}$. Para temperaturas menores a 250 K la aplicación de un campo magnético conduce al sistema de un estado paramagnético (para $170\text{ K} < T < 250\text{K}$) o antiferromagnético (para $T < 170\text{ K}$) a un estado ordenado ferromagnéticamente.

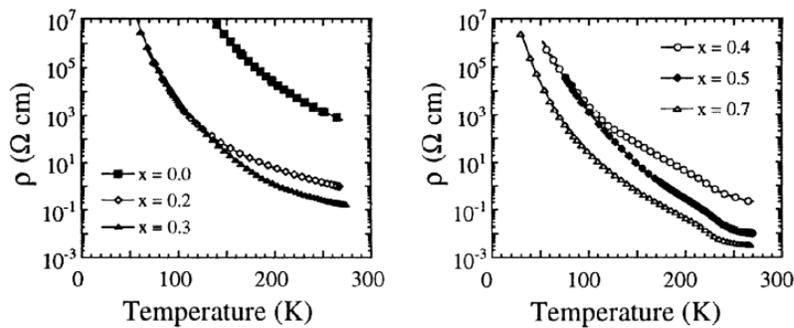


Fig. 1.8 Resistividad vs temperatura a campo cero para varias muestras de $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ [4].

La Fig. 1.8 contiene curvas que muestran la variación de la resistividad como una función de la temperatura para varias muestras de $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ con diferentes concentraciones de Ca [4]. Para todos los valores de x , la resistividad y $-\text{d}\rho/\text{d}T$ aumentan con la disminución de la temperatura. A $T = 4 \text{ K}$ la resistividad ρ excede $10^{10}(\Omega\text{cm})$ para $x = 0.4$. Para $x > 0.2$ existe un cambio notable en la pendiente de la curva ρ vs T , cerca de $T = 250 \text{ K}$ asociado con un cambio estructural y un posible ordenamiento de carga.

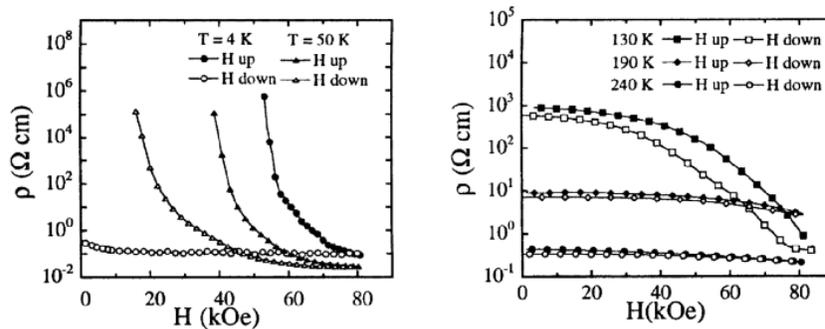


Fig. 1.9 Resistividad vs Campo magnético para $\text{Pr}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{MnO}_3$ a varias temperaturas [4]

La Fig. 1.9 ilustra la resistividad vs el campo magnético a una temperatura fija para una muestra con $x = 0.4$ [4]. A $T = 4 \text{ K}$, la resistividad está inicialmente en un valor muy grande. A medida que se incrementa el campo existe una caída rápida en la curva ρ vs H para $H = 50 \text{ kOe}$. Una disminución más gradual se observa en la curva ρ vs H para un campo aplicado de 80 kOe . Al regresar el campo a 0 kOe se produce solamente un pequeño incremento en la magnitud de la resistividad. Alrededor de $T = 50 \text{ K}$, existe una aparición gradual del estado de alta conductividad para campos del orden de 40 kOe . A $T = 130 \text{ K}$ la resistividad cae con el incremento del campo correspondiendo a una MR negativa del 99.9%. A altas temperaturas la MR negativa puede existir pero el comportamiento es esencialmente reversible para el rango entero de campo que se muestra y los cambios en el valor de ρ vs H son mucho menores en magnitud.

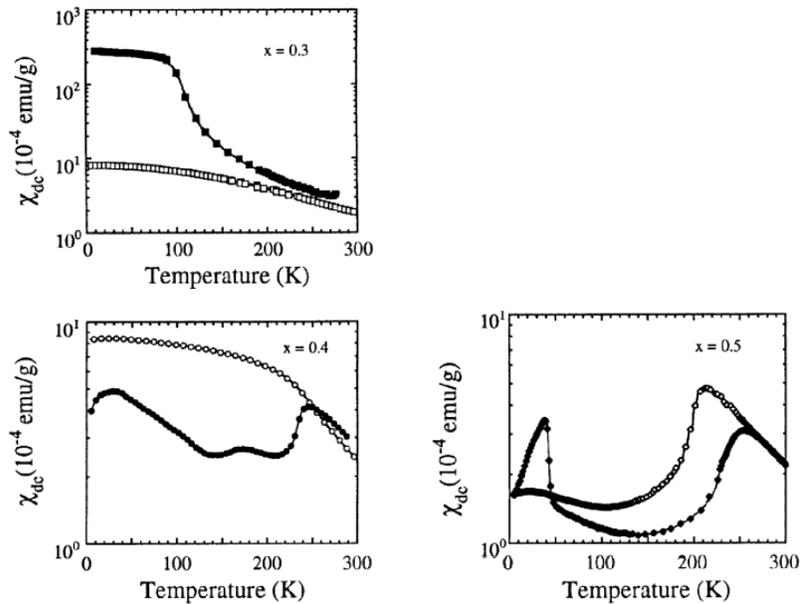


Fig. 1.10 Susceptibilidad DC contra temperatura para $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$, con $x = 0.3, 0.4, 0.5$ para un campo magnético de 1 kOe (símbolos rellenos) y 120 kOe (símbolos vacíos) [4]

Las curvas χ_{dc} vs T a campo bajo se ilustran en la Fig. 1.10 [4]. Para $0.4 \leq x \leq 0.7$ existe un pico ancho cerca de $T = 250$ K, el cual no depende apreciablemente de la temperatura cuando la concentración es variada en este rango de concentraciones. Este máximo está asociado con una transición O-T y ordenamiento de carga que ocurre a esta temperatura. Para $0 \leq x \leq 0.3$ no se presentan picos desde 200 K hasta temperatura ambiente. El máximo alrededor de $T = 160$ K, el cual puede ser visto más claramente en los datos para $x = 4$, indica la aparición de un ordenamiento AFM. El máximo más agudo a $T = 40$ K cuya amplitud aumenta con el incremento de x podría ser atribuido a una reorientación de espines. Estos estudios indican que los ordenamientos CO y AFM presentes en estos compuestos en el rango $0.4 \leq x \leq 0.7$ ocurren a temperaturas distintas.

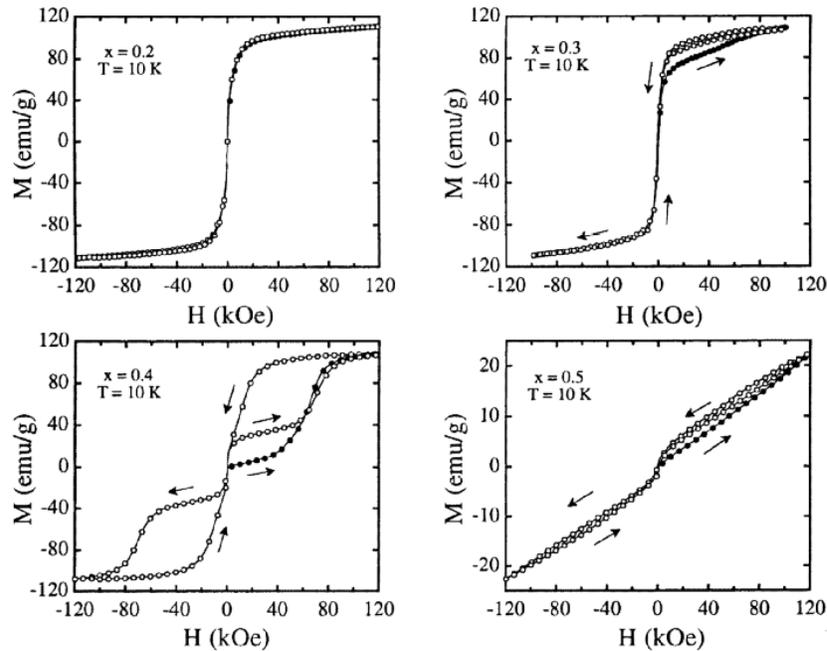


Fig. 1.11 Magnetización vs campo aplicado en $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ con $x = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ para $T = 10 K$ [4].

La Fig. 1.11 muestra ciclos isotérmicos de M vs H a $T = 10 K$, medidos después del protocolo ZFC (enfriando en campo cero) para diferentes concentraciones de Ca [4]. Para $x = 0.2$, la magnetización aumenta rápidamente, alcanzando la saturación en un campo de 20 kOe. Para $x = 0.3$, estos estudios indican que esta concentración se encuentra en una región de cruce en el diagrama magnético de fases. El comportamiento de la magnetización es típico de un ordenamiento FM. Sin embargo un pequeño grado de histéresis y el comportamiento de la magnetización virgen son evidencias de la coexistencia de una fase AFM a campos bajos con una transición metamagnética de AFM a FM y un cambio irreversible en la magnetización del material. Se presenta una pendiente alta en la curva M vs H a 50 kOe y la magnetización continúa incrementándose rápidamente hasta campos de 100 kOe y entonces tiende hacia la saturación. Este comportamiento refleja una transición metamagnética a ordenamiento FM. Con la disminución del campo, la magnetización se mantiene casi constante y se presenta un incremento agudo en dM/dH para $H \cong 20$ kOe. El ciclo M vs H a temperaturas altas para $x = 0.4$ también indica que un comportamiento irreversible está presente en esta muestra hasta temperaturas de al menos 220K. Para $x = 0.5$ el ciclo M vs H exhibe una pequeña histéresis. No se observa ninguna transición metamagnética y no hay tendencia hacia la saturación. Las

curvas de magnetización ilustradas para $x = 0.5$, ilustran un ordenamiento AFM que es estable incluso para campos mayores. Los datos de la Fig. 1.11 indican que para $x = 0.3, 0.4$ existe una transición paramagnética-ferromagnética que ocurre en T_{CO} . En contraste, la curva de campo alto χ_{dc} vs T para $x = 0.5$ es similar a la curva de campo bajo χ_{dc} vs T, la única diferencia consiste en la supresión del pico a baja temperatura, el cual puede corresponder a alguna reorientación de los espines en la muestra. Esta información indica que el ordenamiento CO y AFM es más estable en este sistema para $x = 0.5$.

1.3. EL MECANISMO DE DOBLE INTERCAMBIO

En algunos óxidos se puede presentar una interacción de intercambio ferromagnética, que puede ocurrir porque el ion magnético exhibe una *valencia mixta*, es decir, que puede existir en más de un estado de oxidación. Por ejemplo, algunos compuestos presentan el ion de Mn en el estado de oxidación 3 o 4, es decir, Mn^{3+} o Mn^{4+} , como en el $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ ($0 < x < 1$) que adopta una estructura perovskita. El Sr es divalente (Sr^{2+}) y el La es trivalente (La^{3+}), esto implica que una fracción x de los iones de manganeso son Mn^{4+} y $1-x$ son Mn^{3+} . Los extremos de la serie $x = 0$, $x = 1$ son ambos aislantes antiferromagnéticos, como se esperaría de un material óxido en el cual el magnetismo está mediado por un superintercambio a través del oxígeno. El compuesto $LaMnO_3$ contiene solo iones de Mn^{3+} que es un ion de Jahn-Teller. El $LaMnO_3$ presenta un ordenamiento antiferromagnético tipo A, sin embargo, cuando el $LaMnO_3$ se dopa con Sr, desde $x = 0.175$ la distorsión de Jahn-Teller desaparece y el sistema se torna ferromagnético con una temperatura de Curie cercana a temperatura ambiente, por debajo de la cual el material se torna metálico. Este alineamiento ferromagnético se debe a un mecanismo de *doble intercambio* que se puede entender refiriéndose a la Fig. 1.12. El electrón e_g en un ion Mn^{3+} puede saltar a un sitio vecino solo si existe una vacante allí del mismo espín (puesto que los saltos proceden sin cambiar el espín del electrón). Si el vecino es un Mn^{4+} que no tiene electrones en su capa e_g , el salto ocurre sin inconvenientes. Existe una interacción de intercambio entre el electrón e_g y los tres electrones en el nivel t_{2g} que prefiere mantenerlos todos alineados. Entonces no es energéticamente favorable que un electrón e_g salte a un ion vecino en el cual los espines del nivel t_{2g} sean antiparalelos al electron e_g . Se requiere una

alineación ferromagnética de los iones vecinos para mantener el ordenamiento de espines-altos en los iones donantes y receptores. Dado que la habilidad para saltar produce un ahorro de energía cinética, el proceso de saltos mostrado en la Fig 1.12 reduce la energía total. El alineamiento ferromagnético favorece el transporte electrónico y por lo tanto que el material se torne metálico.

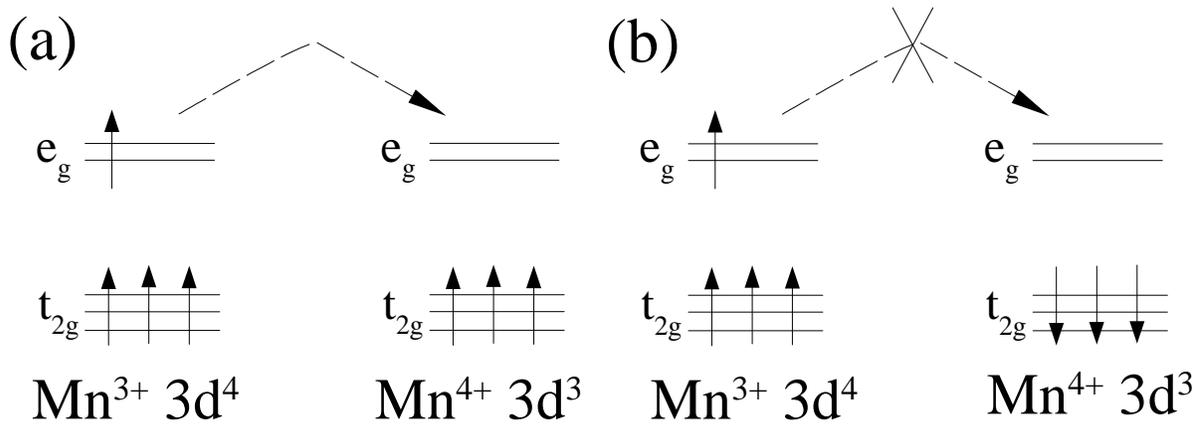


Fig. 1.12 El mecanismo de doble intercambio. a) Favorecido: los iones vecinos están alineados ferromagnéticamente b) No favorecido: los iones vecinos están alineados antiferromagnéticamente

El doble intercambio es, esencialmente, superintercambio ferromagnético en un sistema. El superintercambio ferromagnético normalmente se aplica a dos átomos aislados. La energía cinética ahorrada por la alineación ferromagnética corresponde a saltos hacia un estado excitado. El doble intercambio se aplica a un sistema de tal forma que la energía cinética ahorrada corresponde a una ganancia en el ancho de banda electrónico.

También es posible que la interacción espín-órbita juegue un papel parecido al átomo de oxígeno en el superintercambio. En este caso el estado excitado no está vinculado con el oxígeno pero se produce por una interacción espín-órbita entre el estado excitado de uno de los iones y el estado fundamental del otro ion. Esto se conoce como la *interacción de intercambio anisotrópica*, o también como la interacción de *Dzyaloshinsky-Moriya*. Cuando actúa entre dos espines \vec{S}_1 y \vec{S}_2 conduce a un término en el hamiltoniano, $H_{DM} = \vec{D} \cdot \vec{S}_1 \times \vec{S}_2$. \vec{D} desaparece cuando el campo cristalino tiene inversión de simetría con respecto al centro

entre los dos iones magnéticos. En general \vec{D} no desaparece y permanece paralelo o perpendicular a la línea que conecta los dos espines, dependiendo de la simetría. Su efecto a menudo es el de rotar ligeramente los espines en un ángulo pequeño. Ocurre comúnmente en materiales antiferromagnéticos y tiene como efecto añadir un componente ferromagnético que se produce perpendicularmente al eje del espín del antiferromagnético. Este efecto se conoce como *ferromagnetismo débil*.

1.4. EL ORDENAMIENTO DE CARGA

El ordenamiento de carga ha sido observado en algunos sólidos en los que los electrones se estacionan debido al ordenamiento de diferentes cargas en lugares específicos de la red. Este fenómeno favorece el comportamiento aislante y el antiferromagnetismo [9]; ocurre en algunos óxidos metálicos (por ejemplo, Fe_3O_4) pero hasta el momento en ninguno se ha manifestado tan fuertemente como en las manganitas de tierras raras. Las fases de ordenamiento de carga en estos compuestos son manifestaciones novedosas debidas a interacciones entre portadores de carga y fonones, dando lugar a la localización de portadores de carga en lugares específicos de la red a cierta temperatura.

La amplia variedad de fenómenos que se observan en los óxidos de metales de transición (TM) se debe a un intercambio entre varios grados de libertad. Una propiedad intrínseca de los óxidos de TM dopados es la formación de superestructuras que están relacionadas con los grados de libertad de la carga, el espín, la red y los orbitales. Pueden existir diferentes tipos de ordenamiento de carga (CO), ordenamiento orbital y ordenamiento magnético dependiendo de la presión, temperatura o concentración de dopaje. El ordenamiento de carga se considera normalmente como un ordenamiento de los iones de TM con diferente valencia, por ejemplo, la alternancia entre $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$ en $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ o la de $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ en Fe_3O_4 . Dicho ordenamiento se conoce como ordenamiento de carga de sitio centrado, o equivalentemente, como onda de densidad de carga de sitio centrado (SCDW -del inglés Site Centered Density Wave).

1.5. EL CONCEPTO DE POLARON DE ZENER

En casi 50 años se ha supuesto que en las manganitas de tipo $A_{1-x}Ca_xMnO_3$ (con $A = La, Pr$, etc) solo existía el ordenamiento SCDW centrado en el Mn. Por ejemplo, para $x = 0.5$, este estado SCDW presenta un ordenamiento con la estructura magnética tipo CE (ver Fig. 1.13a), un ordenamiento para el cual existe abundante soporte teórico y experimental. Sin embargo, Daoud-Aladine y colaboradores [10] recientemente han cuestionado esta visión. Estos autores claman que otro tipo de superestructura se asemeja más a los datos experimentales. Esta superestructura es un estado de densidad de carga de enlace centrado (BCDW -del inglés Bond Centered Density Wave, ver Fig. 1.13b), que ellos llaman *Polarón de Zener*. En este estado todos los iones de Mn tienen la misma valencia (Mn^{3+x}), en contraste con el estado SCDW en el cual el Mn se presenta con diferentes valencias. La presencia del estado BCDW implica un cambio drástico en la comprensión del ordenamiento de carga -no solo para las manganitas. Esto implica que en todos los casos de ordenamiento de carga en óxidos se debe tener en cuenta, además del estado SCDW, estados alternativos BCDW.

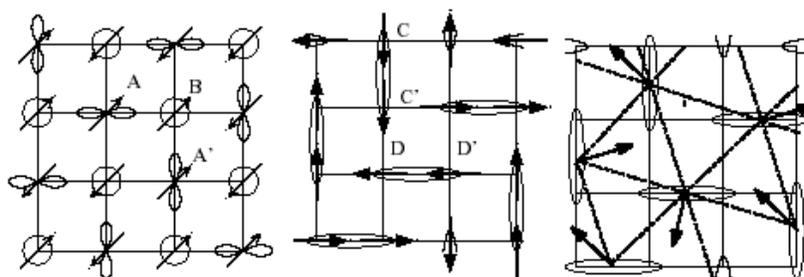


Fig. 1.13. Tres tipos de superestructuras magnéticas/orbitales. a) Fase CE b) Fase Ortogonal c) Fase 120° . La dirección de los espines está indicada por las flechas. Tomada de Ref. [10]

El ordenamiento tipo polarón de Zener también provee una clave para interpretar la anomalía en la susceptibilidad magnética que se observa en la temperatura de ordenamiento de carga (T_{CO}) cuando las muestras se encuentran en estado paramagnético. El cambio en las interacciones magnéticas que varían de ferromagnéticas a antiferromagnéticas para temperaturas menores a T_{CO} , se explican bastante bien dentro de este modelo. Las interacciones ferromagnéticas a temperatura alta son una consecuencia de doble intercambio

dinámico y desordenado. Su desaparición no se debe a que se “desactiva” el doble intercambio, como se acepta comúnmente desde el punto de vista del ordenamiento de carga, si no que se “activan” las correlaciones antiferromagnéticas a causa de que el ordenamiento tipo polarón de Zener cambia la naturaleza de las unidades paramagnéticas: por debajo de T_{CO} las nuevas unidades son pares ferromagnéticos, así que el momento efectivo también se modifica.

El compuesto $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ desde el punto de vista del nuevo paradigma del polarón de Zener ha sido estudiado en profundidad en la Ref. [11], en donde se ha propuesto un modelo tipo Heisenberg frustrado en una red triangular. En este modelo se considera al polarón de Zener como un espín efectivo de magnitud $7/2$.

1.6. REFERENCIAS

- [1] M. Hundley, M. Hawley, R. Heffner, Q. Jia, J. Neumeier, J. Tesmer. Appl. Phys. Lett. vol. **67** (1995), p. 860 (1995)
- [2] J. O'Donnell, M. Onellion, M.S. Rzchowski, J. N. Eckstein, I. Bozovic, Phys. Rev. B vol. **55**, p. 5783 (1997)
- [3] Uehara, Kim y Cheong. Dirección de Internet www.physics.rutgers.edu/~gersh/cmr.htm
- [4] M. Lees, J. Barratt, G. Balakrishnan. J. Phys. Cond. Matter vol. **8**, p. 2967 (1996)
- [5] G. H. Jonker. Physica vol. **22**, p. 707 (1956)
- [6] H. Yoshizawa, H. Kawano, Y. Tomioka, Y. Tokura. Phys. Rev. B vol. **52**, p. 145 (1995)
- [7] Y. Tomioka, A. Asamitsu, Y. Morimoto, Y. Tokura. J. Phys. Soc. Japan vol. **64**, p. 3626 (1995)
- [8] Z. Yirak, S. Vratislav, J. Zajicek. Phys. Status Solidi vol. **52**, p. 39 (1979)
- [9] Rao, C.N.R. J. Phys. Cond. Matter vol. **12**, p. R13 (2000)
- [10] A. Daoud-Aladine, J. Rodriguez-Carvajal, L. Pinsard-Gaudart, M.T Fernandez-Daz, and A. Revcolevschi, Phys. Rev. Lett. vol. **89**, 97206 (2002)
- [11] N.P. Konstantinidis, C.H. Patterson. *Spin Polaron Effective Magnetic Model for $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$* . Cond-mat/0311197. Nov. (2003)

2. ALGUNOS MODELOS MAGNETICOS Y DE POTENCIAL ELECTRICO

En este capítulo se describe brevemente uno de los modelos más importantes en la física estadística, el modelo de Ising [1]. Su sencillez y aplicación a diversos problemas científicos goza la publicación anual de alrededor de 800 artículos relacionados con este modelo [2]. A pesar de su sencillez la solución exacta de este modelo está lejos de ser trivial para dos dimensiones. No ha sido resuelto en el caso tridimensional y parece ser un problema insoluble (ver apéndice A). El modelo de Ising también es parte esencial de un modelo propuesto recientemente denominado el modelo de Kronig-Penney-Ising [3] para la magnetorresistencia colosal en las manganitas.

2.1. EL MODELO DE ISING

Este modelo fue propuesto por Wilhelm Lenz en 1920 y fue resuelto exactamente [1] para una dimensión por su estudiante Ernest Ising en 1925, quien demostró que en este caso el modelo no presenta una transición de fase a temperatura diferente de cero. Lars Onsager resolvió el modelo de Ising en 1944 para dos dimensiones en la ausencia de un campo magnético externo y demostró que éste si presenta una transición de fase a temperatura diferente de cero [4]. La solución de Onsager fue la primera solución exacta que exhibió una transición de fase en un modelo con interacciones de corto alcance.

El modelo de Ising está descrito por el siguiente Hamiltoniano,

$$E = - \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad (2.1)$$

En donde J_{ij} representa la constante de interacción entre vecinos más cercanos, s_i puede ser -1 ó 1, y H indica la intensidad de campo magnético. Las propiedades magnéticas de este modelo pueden ser obtenidas mediante el método metrópolis de Monte Carlo, u otros algoritmos más eficientes cerca de la temperatura crítica como el de Swenden-Wang o el de Wolff [5]. En el capítulo siguiente se hará la descripción de un método híbrido, que al igual que los algoritmos mencionados, evita la no ergodicidad¹ del sistema y permite la simulación numérica del modelo de Ising más eficientemente.

Entre algunos de los resultados obtenidos por Onsager para el modelo de Ising en dos dimensiones para una red cuadrada², se encuentran: (1) la determinación de la temperatura crítica T_c , (2) la curva exacta para la magnetización, (3) el comportamiento de la susceptibilidad (χ) y (4) la capacidad calorífica (C) en temperaturas cercanas a T_c . Estos resultados pueden observarse en las siguientes ecuaciones.

La temperatura crítica T_c se puede determinar mediante la siguiente expresión,

$$\sinh\left(\frac{2J}{K_b T_c}\right) = 1 \quad (2.2)$$

o lo que es lo mismo,

$$\frac{K_b T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269 \quad (2.3)$$

La magnetización exacta está dada por la siguiente expresión que se ilustra en la Fig. 2.1.

- 1 La ergodicidad está relacionada con la toma de muestras de los estados importantes del sistema. En una simulación de Monte Carlo la existencia de la ergodicidad depende de la manera en que se generan nuevas configuraciones y en la naturaleza de las barreras energéticas entre microestados.
- 2 Las operaciones matemáticas involucradas en la solución de Onsager son bastante complicadas y no pueden generalizarse para otros sistemas. Por esta razón son pocos los investigadores de la mecánica estadística que han estudiado esta solución con gran detalle.

$$m(T) = \begin{cases} 0 & \text{para } T \geq T_c \\ \left(1 - \left(\sinh\left(\frac{2J}{K_b T}\right)\right)^{-4}\right)^{1/8} & \text{para } T < T_c \end{cases} \quad (2.4)$$

En las cercanías a T_c , la susceptibilidad (χ) y capacidad calorífica (C) se comportan de la siguiente manera,

$$\chi \approx \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right|^{-7/4} \quad (2.5)$$

$$C \approx \ln \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right| \quad (2.6)$$

Los resultados más importantes de la solución exacta del modelo de Ising en dos dimensiones son: la energía es una función continua para todas las temperaturas, la magnetización se desvanece continuamente en $T = T_c$, la capacidad calorífica diverge logarítmicamente en $T = T_c$, y la divergencia de la susceptibilidad a campo cero sigue una ley de potencia.

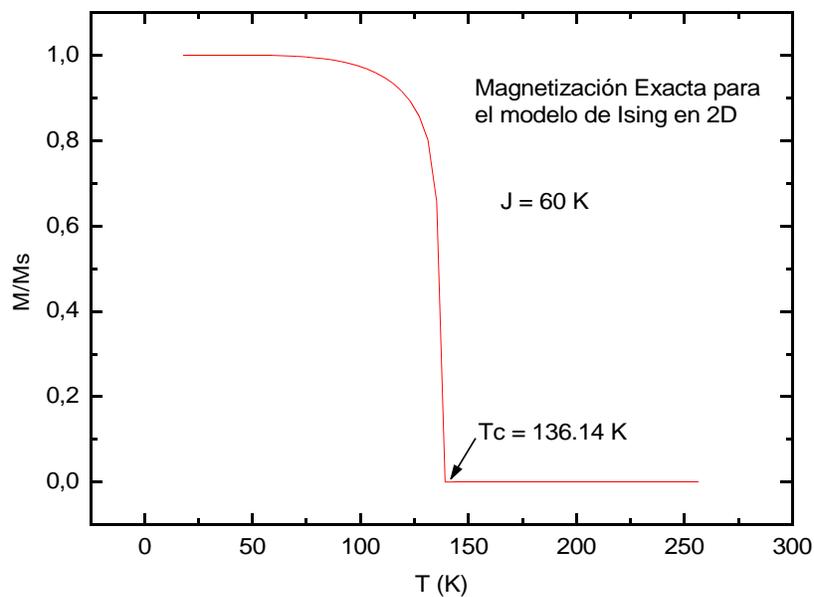


Fig. 2.1 Magnetización espontánea exacta para el modelo de Ising en dos dimensiones para una red cuadrada.

2.2. MODELO DE KRONIG-PENNEY

El modelo de Kronig-Penney [6] considera un potencial eléctrico periódico -como el de la Fig.2.2- para un cristal idealizado, en el cual una partícula puede moverse en un potencial de periodo $l=a+b$, formado por un pozo de potencial de anchura a y profundidad V_0 , y una barrera de potencial de anchura b . Fue introducido en 1931, y su importancia radica en que muestra la aparición de bandas energéticas debidas al tunelamiento de los electrones a través del potencial eléctrico periódico.

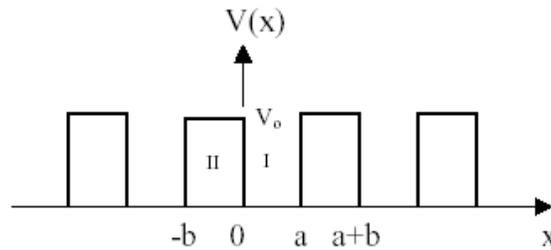


Fig.2.2 Potencial periódico en el modelo de Kronig-Penney

Algunos resultados generales del modelo de Kronig-Penney son:

- Si la barrera de potencial entre los pozos es fuerte, las bandas de energía son estrechas y separadas entre si. Este caso corresponde a cristales en los cuales los electrones están fuertemente ligados a los núcleos, y las funciones de onda no se traslapan mucho con núcleos adyacentes.
- Si la barrera de potencial entre los pozos es débil, las bandas de energía son anchas y cercanas entre si. Esta es la situación típica de metales con electrones débilmente ligados al núcleo, como en los metales alcalinos.

2.3. EL MODELO DE KRONIG-PENNEY-ISING PARA LA CMR

Se han propuesto diferentes modelos para describir el fenómeno de CMR, algunos de ellos basados en una interacción compleja entre los grados de libertad electrónicos y de red

(polarón). Entre ellos, el concepto de doble intercambio ha sido el paradigma por varias décadas, a pesar de no explicar las diferencias cualitativas de la conducción eléctrica para todo el rango de concentraciones para uno de los materiales con CMR más estudiados, como es el sistema $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$. Recientemente Vandevale, Auloos y Cloots [1] han propuesto un modelo diferente basado en que los grados de libertad magnéticos, como el espín, proveen la contribución básica al fenómeno CMR para temperatura y campo magnético.

En este modelo se combinan tres ingredientes simples para enfatizar el rol de los grados de libertad magnéticos:

- El modelo de Ising para describir la energía magnética del sistema,
- La fórmula de Drude para la conductividad eléctrica,
- Dispersión causada por los saltos electrónicos (Hopping).

En términos de simulación numérica, el mecanismo de saltos electrónicos (hopping) consiste en enviar electrones de un extremo a otro de la red. Dentro de una misma región magnética (espines orientados en la misma dirección) el electrón se puede mover con libertad, pero cuando un electrón encuentra una pared de dominio para pasar a otra región en la que los espines están orientados en dirección opuesta, el electrón se detiene con una probabilidad $(1-p)$. Por analogía al efecto túnel, se asume que p tiene la siguiente forma,

$$p = \exp(-\gamma s) \quad (2.7)$$

En donde γ es un parámetro adimensional que puede relacionarse con la “altura” de las barreras de potencial, y s es el tamaño del grupo de espines que el electrón tiene adelante.

De acuerdo a la fórmula de Drude, la resistividad se obtiene directamente de,

$$\rho = \frac{\tau}{L} \quad (2.8)$$

en donde L es el tamaño de la red, y τ el tiempo promedio que le toma a un electrón cruzarla.

El modelo de Kronig-Penney-Ising se puede describir como un modelo magnético de Kronig-Penney dependiente de la temperatura en un campo eléctrico, puesto que cada pared es una barrera de potencial en la cual su magnitud está controlada por condiciones magnéticas y térmicas. El nuevo ingrediente es que las barreras están correlacionadas y controladas por la termodinámica del modelo de Ising, en tiempo y espacio.

2.4. MODELO DE HEISENBERG CLASICO

El Hamiltoniano de Heisenberg clásico [7] es similar al del modelo de Ising con la diferencia de que los espines pueden estar orientados en cualquier dirección en tres dimensiones.

$$E = - \sum_{i=1}^N \sum_{(i,j)} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \vec{H} \cdot \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \quad (2.9)$$

en donde \vec{s}_i es un vector unitario, J_{ij} es la integral de intercambio, y \vec{H} el vector que contiene la magnitud y la dirección del campo magnético aplicado. Los espines pueden tener tres componentes, en contraste con el modelo de Ising en el cual tienen un solo componente.

Shenker y Tobochnik [8] demostraron que el modelo de Heisenberg en dos dimensiones no presenta una transición de fase por medio de una combinación de métodos de Monte Carlo con técnicas de grupos de renormalización. Sin embargo, la ausencia de una prueba rigurosa ha dado espacio para argumentar que sí puede existir una transición de fase [9].

2.5. REFERENCIAS

- [1] E. Ising, Z. Physik vol. **31**, p. 253 (1925)
- [2] Conferencia Centenario de Ising, Belo Horizonte. Brasil. (2000)
- [3] N. Vaudewalle, M. Ausloos, and R. Cloots. Phys. Rev. B. vol. **59**, p. 909 (1999)
- [4] L. Onsager, Phys. Rev. vol **65**, p. 117 (1944)
- [5] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. vol. **62**, p. 361 (1989)

[6] R. De. L. Kronig and W.G. Penney, Proc. Roy. Soc. London vol. **130**, p. 499 (1931)

[7] W. Heisenberg, Z. Physik vol. **49**, p. 619 (1928)

[8] S.H. Shenker and J. Tobochnik, Phys. Rev. B vol. **22** (1980)

[9] A. Patrascioiu and E. Seiler, Phys. Lett. B vol. **430** (1998)

3. TECNICA DE SIMULACION: UN METODO HIBRIDO

En este capítulo se describe el método usado para obtener el comportamiento magnético de un sistema de espines descrito por los modelos magnéticos mencionados en el capítulo anterior. Se hace una descripción muy breve del Método de Monte Carlo y de los algoritmos utilizados en este trabajo. Finalmente, se combinan las fortalezas de cada algoritmo para generar un método híbrido de aplicabilidad general en simulación de modelos magnéticos.

Todos los modelos magnéticos descritos en el capítulo anterior pueden simularse mediante el método de Monte Carlo y un algoritmo específico para estos modelos como el algoritmo de Metrópolis [1]. Al tratar de simular estos modelos en computadores personales -e incluso en máquinas mucho más poderosas- rápidamente se encuentran limitaciones especialmente en el tamaño de la red, y la confiabilidad de los resultados, que difícilmente se pueden sobrepasar usando estas técnicas básicas en tiempos de simulación razonables. Sin embargo, el interés mundial por sobrepasar dichas barreras ha permitido la creación de algoritmos mucho más eficientes y métodos que permiten mejorar los tiempos de simulación y la calidad de los resultados.

El nuevo método introducido en este trabajo para simular la magnetorresistencia colosal mediante el modelo de Kronig-Penney-Ising requiere la combinación de las técnicas de simulación mostradas en este capítulo para los modelos magnéticos y de una expresión analítica para la resistividad que se desarrolla en el capítulo siguiente, sin los cuales habría sido imposible realizar las simulaciones de este trabajo.

3.1. EL METODO DE MONTECARLO EN SISTEMAS MAGNETICOS

En el método de Monte Carlo se toma una muestra aleatoria de puntos de un espacio de fase, y a partir de estos datos se encuentra el comportamiento global del sistema. El modelo de Ising en dos dimensiones es uno de los ejemplos más simples de la aplicación de las técnicas de Monte Carlo a la física estadística, aun así su simulación numérica desde el punto de vista cuantitativo (y cualitativo para redes muy grandes) requiere el uso de computadores rápidos o de algoritmos eficientes y técnicas especiales. La investigación en este campo es intensa, por lo que existen muchísimas variantes y métodos que bajo condiciones particulares pretenden obtener resultados más precisos y de forma más eficiente, como en las Refs. [2] y [3]. Las optimizaciones en la técnica de simulación utilizadas en este trabajo no implican una reducción en el carácter general del problema, en oposición al desarrollado en la Ref. [4].

3.1.1. Cálculo de algunas cantidades físicas

Las cantidades físicas más importantes para modelos magnéticos que pueden obtenerse mediante simulaciones de Monte Carlo son:

La magnetización (M) y la magnetización por espín (m) para una red con N espines, que están dadas por,

$$M = \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \quad (3.1)$$

$$m = \frac{M}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \quad (3.2)$$

La capacidad calorífica,

$$C = \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (3.3)$$

y la susceptibilidad magnética,

$$\chi = \frac{1}{kT} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (3.4)$$

La configuración microscópica del sistema o *microestado*, corresponde a un arreglo particular de los momentos magnéticos del sistema. Pueden existir muchos posibles microestados en un sistema con muchos grados de libertad, aún así el sistema puede ser descrito en términos de algunas variables macroscópicas (como la magnetización o la susceptibilidad), que definen un *macroestado*. La física estadística asume que el sistema puede ser encontrado con igual probabilidad (P_s) en cualquiera de los microestados posibles (Ω). Sin embargo, la probabilidad de ocupar la mayoría de los macroestados posibles es pequeña, y el sistema estará confinado a un rango pequeño de macroestados para un conjunto dado de condiciones canónicas. Se pueden encontrar las magnitudes macroscópicas, generando una colección o *ensamble* de sistemas que son réplicas idénticas caracterizadas por un mismo macroestado. El número de sistemas en el ensamble es igual al número de microestados posibles. El promedio de una cantidad física A que tiene como valor A_s cuando el sistema está en el estado s está dado por:

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^{\Omega} A_s P_s \quad (3.5)$$

La elección de Metrópolis et al para P_s es la probabilidad de Boltzmann, que convenientemente reduce los promedios a,

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_{i=1}^{\Omega} A_s \quad (3.6)$$

Dado que Ω corresponde a todos los microestados posibles, para sistemas con muchas partículas es prácticamente imposible hallarlos todos, por lo que se puede estimar un valor para A promediando sobre varias configuraciones representativas (Ω_e).

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{\Omega_e} \sum_{i=1}^{\Omega_e} A_s \quad (3.7)$$

Para determinar el comportamiento de un sistema, se pueden fijar tres cantidades macroscópicas, y luego calcular como se comportan las otras propiedades del sistema. Por ejemplo, si el número de partículas (N), el volumen (V) y la energía del sistema (E) se dejan fijas, se habla del *ensamble microcanónico*, el cual corresponde a un sistema aislado. Un sistema que pueda intercambiar energía con su entorno, se denomina *ensamble canónico*, en donde N,V y la temperatura (T) son fijos. En este trabajo se ha utilizado principalmente el ensamble canónico, sin embargo el método híbrido que se describirá más adelante hace uso de ambos ensambles.

3.1.2. Criterio de Convergencia

Mientras el número de observaciones que se hacen en una simulación de Monte Carlo es mayor, el error obtenido en los resultados es más pequeño. Sin embargo, para obtener resultados confiables y ahorrar tiempo de simulación, en vez de utilizar un número de pasos de Monte Carlo (MCS) fijo, para las simulaciones de este trabajo se ha establecido un criterio de convergencia que permite determinar los pasos necesarios para obtener la precisión deseada. Se repite el procedimiento de Monte Carlo hasta que la cantidad a determinar A cumpla con este criterio, dando lugar a resultados confiables. El criterio de convergencia utilizado es el siguiente,

$$\left(\frac{|\rho_i - \langle \rho_{i-1} \rangle|}{\rho_i} \leq 10^{-7} \wedge \frac{|A_i - \langle A_{i-1} \rangle|}{A_i} \leq 10^{-7} \right) \vee MCS > 5 \times 10^7 \quad (3.8)$$

en donde ρ_i y A_i son respectivamente, la resistividad y la cantidad A (magnetización, energía, susceptibilidad, etc) en el paso de Monte Carlo i , y MCS es el número de pasos de Monte Carlo.

3.2. ALGUNOS ALGORITMOS PARA LA SIMULACION DE MODELOS MAGNETICOS

El uso de las simulaciones de Monte Carlo se ha incrementado sustancialmente en los últimos años, en parte debido a la mejora dramática de rendimiento en los computadores, pero aún más

importante, al desarrollo de técnicas de análisis y simulación más poderosas [5]. Algunas de las mejoras en las técnicas de simulación incluyen el desarrollo de versiones rápidas de los algoritmos de actualización local (Metropolis) para una variedad de modelos, y los algoritmos de actualización por clusters (Swendsen-Wang, Wolff) que reducen dramáticamente el tiempo de correlación en una simulación.

3.2.1. Algoritmo de Metropolis

El Algoritmo Metropolis de Monte Carlo fue introducido por Metropolis Teller [1] y Rosenbluth en 1953 y puede resumirse en los siguientes ocho pasos del cuadro 3.1.

CUADRO 3.1. Pasos básicos del algoritmo de Metropolis

1. Establecer un microestado inicial.
2. Seleccionar un espín al azar y girarlo en dirección opuesta.
3. Calcular ΔE : el cambio en energía
4. Si $\Delta E \leq 0$, acepte el microestado y salte al paso 8.
5. Si $\Delta E > 0$, calcule $w = e^{-\Delta E/kT}$
6. Generar un número aleatorio $0 < r < 1$.
7. Si $r \leq w$, acepte el nuevo microestado, en caso contrario retenga el microestado previo.
8. Determine las cantidades físicas deseadas.

3.2.2. Algoritmo de Wolff

La idea básica de los algoritmos de actualización por clusters [5], como el de Swendsen and Wang o el de Wolff, es identificar los clusters de espines similares (o iguales para el modelo de Ising) y tratarlos como un espín gigante, cuyo valor se invierte de acuerdo a un criterio aleatorio. Estos algoritmos son muy eficientes en temperaturas cercanas a la temperatura crítica, lo que los hace ideales para estudiar exponentes críticos. Una de las grandes ventajas de estos algoritmos sobre los algoritmos de actualización local (como el de Metropolis o el de Glauber) consiste en la eliminación de la *lentitud crítica* (el término en inglés es *critical slowing down*). Aunque no existe una verdadera evolución en el tiempo, el proceso de Monte

Carlo puede verse como una clase de dinámica, que define un tiempo de relajación. Dicho tiempo de relajación diverge más rápidamente que el tiempo de correlación para los algoritmos locales (como el de Metrópolis), lo que implica que se necesitan muchos pasos de Monte Carlo para generar configuraciones independientes (no correlacionadas) y el muestreo se restringe a solo una porción del espacio de estado. En los algoritmos no locales (como el de Wolff) el tiempo de relajación es del orden de un solo paso de Monte Carlo, por lo que cada configuración puede usarse para obtener los promedios de las cantidades físicas requeridas. Los pasos generales del algoritmo de Wolff [6] se especifican en el siguiente cuadro,

CUADRO 3.2. El algoritmo básico de Wolff

1. Escoger un espín al azar en la red
2. Construir el cluster de espines correlacionados comenzando desde este espín como una “semilla”, conectando los vecinos más cercanos de igual espín con una probabilidad $p=1-\exp(-2J/k_bT)$. Este proceso se repite recursivamente hasta que el cluster no pueda crecer más.
3. Invertir este cluster de espines correlacionados (esto corresponde a un paso de Monte Carlo)
4. Usar la nueva configuración en el promedio de las cantidades requeridas.
5. Volver al paso 1 hasta obtener la precisión o pasos de Monte Carlo deseados.

3.2.3. Algoritmo del diablillo

Este algoritmo de Monte Carlo fue desarrollado por Creutz [7] para simular el ensamble microcanónico (N,V,E fijos). Consiste en añadir un grado extra de libertad llamado *diablillo*, que viaja a través del sistema transfiriendo energía mientras intenta modificar las variables dinámicas del mismo. Si un cambio deseado disminuye la energía del sistema, el diablillo otorga la energía requerida al sistema si tiene suficiente energía. La única limitación es que el diablillo no puede tener energía negativa. El algoritmo básico está descrito en el siguiente cuadro.

CUADRO 3.3. El algoritmo básico del Diablillo

1. Escoger una partícula al azar e intentar un cambio aleatorio en su posición (o estado)
2. Calcular ΔE , el cambio en la energía del sistema debido al intento aleatorio.
3. Si $\Delta E \leq 0$, el sistema otorga $|\Delta E|$ al diablillo, y la configuración probada se acepta.
4. Si $\Delta E > 0$ y el diablillo tiene suficiente energía para cambiar, le concede la energía necesaria al sistema, y la configuración probada se acepta.
5. En caso contrario no se acepta la nueva configuración
6. Continuar en el paso 1

3.3. UN METODO DE MONTE CARLO HIBRIDO

Cada algoritmo tiene sus fortalezas y debilidades. El algoritmo de Metrópolis es muy eficiente equilibrando fluctuaciones de corto alcance en el sistema, además de que existen implementaciones multi-espines altamente optimizadas [8]. Desafortunadamente, el método de Metrópolis no es eficiente decorrelacionando los clusters de largo alcance que caracterizan el comportamiento del sistema en las cercanías al punto crítico. El algoritmo de Wolff por otro lado, concentra su esfuerzo en clusters grandes conduciendo a tiempos de correlación muy reducidos y a un exponente crítico dinámico z muy pequeño. Sin embargo, las estructuras a menor escala en el sistema, en particular en las regiones de desorden, no son simuladas eficientemente por el algoritmo de Wolff. Otro inconveniente de este algoritmo es su sensibilidad a las fallas del generador de números aleatorio que induce desviaciones pequeñas pero significativas.

Si la velocidad y eficiencia del algoritmo de Metrópolis para equilibrar estructuras a pequeña escala se combina con la fortaleza del algoritmo de Wolff decorrelacionando estructuras de gran escala, el algoritmo resultante es de hecho, más eficiente que el de Metrópolis o Wolff individualmente [3]. La combinación de dos algoritmos autosuficientes para el mismo ensamble canónico en un solo algoritmo aumenta el rendimiento, reduce los errores estadísticos y los errores introducidos por un generador de números aleatorio imperfecto en las simulaciones.

Otra alternativa consiste en simular para ensambles diferentes como el canónico y el microcanónico simultáneamente [9]. De esta forma se pueden sobrepasar estados metaestables, (en otras palabras, decorrelacionar configuraciones rápidamente) que son muy comunes en el método de Metrópolis para redes relativamente grandes, y que presentan una alta dependencia a las condiciones iniciales (por ejemplo, es difícil obtener resultados correctos para una configuración inicial tipo *ajedrez* en un modelo de Ising bidimensional para una red de 80x80 espines). El algoritmo del diablillo ha sido usado en este trabajo para simular el ensamble microcanónico (N, V, T varían mientras la energía permanece constante) combinándolo con el algoritmo de Metrópolis (o el de Wolff).

Siguiendo esta línea de pensamiento, ambos métodos híbridos se pueden combinar en otro que herede sus fortalezas. Por ejemplo, podría usarse un algoritmo que por cada paso de Wolff se simulen diez de Metrópolis más uno del diablillo. El algoritmo híbrido resultante debe ser aún más eficiente produciendo configuraciones no correlacionadas de espines, y reduciendo los errores estadísticos, según se supone en la Ref. [9]. Este ha sido el algoritmo utilizado para las simulaciones realizadas en este trabajo, debido a que las simulaciones de magnetorresistividad son muy susceptibles al tamaño de la red (como se mostrará más adelante) y se requiere en este caso un algoritmo capaz de aumentar el rendimiento de cada uno de los algoritmos mencionados anteriormente y que además produzca resultados confiables.

Para las simulaciones de este trabajo, se usa el trío Metrópolis-Wolff-Diablillo apropiadamente “calibrado”, es decir, la elección de $m:w:d$, m pasos de Metrópolis, w pasos de Wolff, y d pasos de diablillo, a campo magnético externo nulo, mientras que para un campo aplicado se usa la combinación Metrópolis-Diablillo. Esto debido a que el algoritmo de Wolff no incluye la presencia del campo magnético, que puede ser incluido mediante un espín fantasma [10] (ghost spin), y ha sido utilizado satisfactoriamente para algunos casos particulares [11]. Sin embargo, la pérdida de la eficiencia en el algoritmo y de la aplicabilidad a cualquier modelo magnético no justifican su uso para los propósitos de este trabajo.

3.4. REFERENCIAS

- [1] N. Metropolis, A.W Rosenbluth, A.H. Teller and E. Teller. J. Chem. Phys. vol. **21** (1953)
- [2] M. Scott Shell, Pablo G. Debenedetti, Athanassios Z. Panagiotopoulos. J. Chem. Physics. vol **119** (2003)
- [3] J. A. Plascak, Alan M. Ferrenberg, and D.P. Landau. Cond-mat/0205264 (2002)
- [4] M. Henkel, and M. Pleimling. Cond-mat/010845 (2002)
- [5] R.H. Swendsen, J-S. Wang. Phys. Rev. Lett. vol. **58** (1987)
- [6] U. Wolff. Phys. Rev. Lett. vol. **62** (1989)
- [7] M. Creutz. Phys. Rev. D vol. **38** (1987)
- [8] D.P.Landau. *Vectorization of Monte Carlo programs for lattice models using supercomputers* de Ref. [3]
- [9] D.W. Heerman, P. Nielaba, and M. Rovere. Comp. Phys. Commun. vol. **60** (1990)
- [10]V. S. Dotsenko, W. Selke, and A. L. Talapov, Physica A vol. **170** (1990)
- [11]O. Dillmann, W. Janke, M. Müller and K. Binder, J. Chem. Phys. vol. **114** (2001)

4. UN METODO EXACTO PARA LA SIMULACION DEL MODELO DE KRONIG-PENNEY-ISING

En este capítulo se introduce un nuevo método desarrollado en este trabajo para la simulación del modelo de Kronig-Penney-Ising [1] basado en la simulación por las técnicas de Monte Carlo descritas en el capítulo anterior para el comportamiento magnético del sistema y del cálculo de la resistividad para una configuración de espines dada mediante una expresión analítica que se desarrolla a continuación.

El algoritmo usado por R. Lillis [2] para el modelo de Kronig-Penney-Ising [1] puede ser optimizado considerablemente calculando analíticamente el tiempo promedio (τ) que le toma a un electrón atravesar la red para cada configuración de espines generada por medio del algoritmo de Metrópolis o el del Wolff. La mejora implica tiempos de simulación muchísimo más pequeños, una reducción en la cantidad de parámetros necesarios para el algoritmo, y resultados mucho más precisos.

A continuación se hallará una expresión matemática para τ y la resistividad y se describirá el método desarrollado en este trabajo.

4.1. EXPRESION ANALITICA PARA LA RESISTIVIDAD

Supongamos que en una red bidimensional de $(N_x N_y)$ espines, como la ilustrada en la Fig.4.1, los electrones se transfieren de izquierda a derecha a lo largo del eje x .

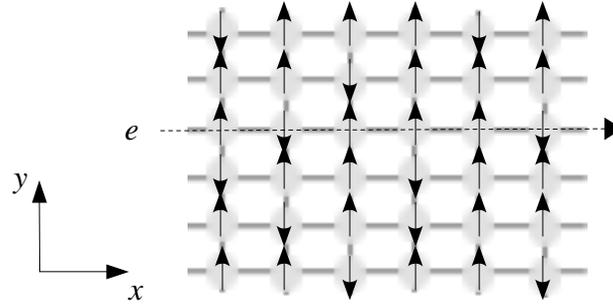


Fig. 4.1 Transmisión de un electrón a lo largo del eje x en una red bidimensional tipo Ising

Si n_y es el número de clusters que un electrón encuentra en su trayecto y s_{iy} la longitud del cluster i , el tiempo promedio τ_y que le toma a un electrón lanzado desde el sitio de red $(1,y)$ atravesar la red puede hallarse mediante la siguiente expresión,

$$\tau_y = \sum_{i=1}^{n_y} s_{iy} + \sum_{i=1}^{n_y} \sum_{j=1}^{+\infty} (1 - \exp(-\gamma s_{iy}))^j \quad (4.1)$$

en donde $(1 - \exp(-\gamma s_{iy}))^j$ representa la probabilidad de que el electrón se detenga j veces consecutivas en la pared magnética i . La primera sumatoria corresponde al tiempo promedio que le toma al electrón moverse en una región sin barreras de potencial, mientras que la segunda sumatoria es el tiempo promedio que el electrón se detiene en las barreras de potencial. La suma del tamaño de los n_y clusters es igual a la longitud de la red en el eje x (N_x), es decir,

$$\tau_y = N_x + \sum_{i=1}^{n_y} \sum_{j=1}^{+\infty} (1 - \exp(-\gamma s_{iy}))^j \quad (4.2)$$

Para toda la red bidimensional, es decir lanzando N_y electrones desde los sitios de red $(1,1), (1,2), \dots, (1, N_y)$,

$$\tau = N_x + \frac{1}{N_y} \sum_{y=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{n_y} \sum_{j=1}^{+\infty} (1 - \exp(-\gamma s_{iy}))^j \quad (4.3)$$

NOTA

La ecuación 4.3 es más general y exacta que la aproximación obtenida en la Ref.[1] (ecuación 4.4) en donde el tamaño de los clusters para una red cuadrada de longitud L se representa por un único valor llamado tamaño característico de los clusters ξ .

$$\tau = L + \frac{L}{\xi} \sum_{j=1}^{+\infty} (1 - \exp(-\gamma \xi))^j \quad (4.4)$$

Puede obtenerse la ecuación 4.4 a partir de la ecuación 4.3 al hacer $s_{iy} = \xi$, con $n_y = L/\xi$, y $N_x = N_y = L$.

Sin embargo, mayores simplificaciones pueden lograrse al hacer uso de la serie geométrica¹, se observa que,

$$\sum_{j=1}^{+\infty} (1 - \exp(-\gamma s_{iy}))^j = \exp(\gamma s_{iy}) - 1 \quad (4.5)$$

Haciendo uso de la relación 4.5 en la ecuación 4.3, el tiempo promedio que le toma a los electrones atravesar la red es,

$$\tau = N_x + \frac{1}{N_y} \sum_{y=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{n_y} (\exp(\gamma s_{iy}) - 1) \quad (4.6)$$

La ecuación 4.7 representa la resistividad según la fórmula de Drude ajustada para que sea cero cuando el electrón no encuentra barreras de potencial al cruzar la red (todos los espines están orientados en la misma dirección).

$$\rho = \frac{\tau}{N_x} - 1 \quad (4.7)$$

La resistividad para toda la red está dada por:

$$\rho = \frac{1}{N_y N_x} \sum_{y=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{n_y} (\exp(\gamma s_{iy}) - 1) \quad (4.8)$$

1 La serie geométrica se define así: $\sum_{i=0}^{+\infty} z^i = 1 + z + z^2 + z^3 + \dots + z^n + \dots = \frac{1}{1-z}$ por lo tanto

$$\sum_{i=1}^{+\infty} z^i = \frac{1}{1-z} - 1$$

Se puede generalizar la ecuación 4.8 para una red tridimensional de $(N_x N_y N_z)$ espines, hallando la resistividad a partir de la resistividad para cada plano xy .

$$\rho = \frac{1}{N_z} \sum_{z=1}^{N_z} \rho_z = \frac{1}{N_z N_y N_x} \sum_{z=1}^{N_z} \sum_{y=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{n_y} (\exp(\gamma s_{iyz}) - 1) \quad (4.9)$$

Mediante la expresión 4.9 se puede calcular directamente la resistividad para una configuración de espines sin necesidad de utilizar el algoritmo usado por Lillis [2]. Las limitaciones impuestas por este algoritmo en la simulación del modelo de Kronig-Penney-Ising son rápida y efectivamente sobrepasadas mediante el uso de esta expresión. Una comparación de las mejoras con respecto a la precisión y velocidad será realizado más adelante.

Una expresión útil es el valor estimado de la resistividad a partir del tamaño promedio de las barreras de potencial ($\langle s \rangle$),

$$\langle s \rangle = \sum_{z=1}^{N_z} \sum_{y=1}^{N_y} \left(\frac{1}{n_y} \sum_{i=1}^{n_y} s_{iyz} \right) \quad (4.10)$$

$$\rho \approx \frac{1}{\langle s \rangle} (\exp(\gamma \langle s \rangle) - 1) \quad (4.11)$$

4.2. DESCRIPCION DEL METODO

El método desarrollado y utilizado en este trabajo para simular el modelo de Kronig-Penney-Ising requiere la combinación de dos grandes elementos: La simulación del modelo de Ising para generar las configuraciones de espines y el cálculo exacto de la resistividad para cada configuración. Este método se caracteriza por ser la combinación de un método aproximado, el método de Monte Carlo y otro exacto, el cálculo de la resistividad, mientras que el método usado en la Ref. [2] combina dos algoritmos tipo Monte Carlo, uno para la el cálculo de las propiedades magnéticas y otro para las propiedades eléctricas.

4.2.1. Algoritmo del método

Los pasos generales para la simulación de las propiedades magnéticas siguen el método de Monte Carlo, ya sea mediante el algoritmo de Metrópolis o el de Wolff, mientras que el cálculo de las propiedades eléctricas (ver paso 3 en el cuadro 4.1) se realiza por medio del cálculo exacto de la resistividad para una configuración magnética dada.

CUADRO 4.1. Algoritmo general para simular el modelo de Kronig-Penney-Ising

1. *Partir de una configuración inicial de espines y equilibrar el sistema mediante el método de Monte Carlo y el hamiltoniano de Ising para una temperatura y campo dados*
2. *Repetir pasos de Monte Carlo hasta obtener una configuración estadísticamente independiente*
3. *Calcular la resistividad para la configuración de espines, mediante la expresión 4.9*
4. *Calcular variables físicas (magnetización, energía, etc)*
5. *Regresar al paso 2 hasta cumplir con el criterio de convergencia*
6. *Obtener $\langle M \rangle$, $\langle E \rangle$, $\langle \rho \rangle$, etc*
7. *Fin o regresar al paso 1 para simular con otra temperatura y/o campo magnético*

4.3. REFERENCIAS

[1] N. Vaudewalle, M. Ausloos, and R. Cloots. Phys. Rev. B. vol. **59**, p. 909 (1999)

[2] R. Lillis. *Ising Model Simulation of the Conductive Properties of Mixed Valence Manganites*. Dirección de internet: <http://www.maths.tcd.ie/~robbs/report.pdf> (2001)

5. RESULTADOS Y DISCUSION

En este capítulo se muestran los resultados y discusión de las simulaciones obtenidas en este trabajo. Se realiza una comparación entre los resultados de simulación de varios algoritmos de Monte Carlo para el modelo de Ising que verifican las ventajas de usar métodos híbridos en la simulación de modelos magnéticos. Se compara el método de la Ref. [1] para la simulación del modelo de Kronig-Penney-Ising [2] con el método desarrollado en este trabajo (ver capítulo 4), que resulta ser impresionantemente más rápido y exacto.

Las simulaciones numéricas que se muestran en este capítulo fueron realizadas en un computador personal AMD Athlon de 1.1 GHz. Sin las optimizaciones en el método de simulación (ver capítulos anteriores) habría sido muy dispendioso obtener estos resultados incluso usando computadores diseñados específicamente para realizar cálculos numéricos.

5.1. ESTRUCTURA GENERAL DE INTERACCIONES ENTRE VECINOS

Los resultados de simulación que se discuten en este capítulo se obtuvieron utilizando la estructura general entre vecinos mostrada en la Fig. 5.1, en la cual J_1 y J_2 corresponden a interacciones de intercambio entre primeros vecinos y J_3 y J_4 a las de segundos vecinos. Esta estructura permite simular algunos casos particulares sin necesidad de modificar el programa que realiza la simulación. Por ejemplo, puede considerarse un caso trivial en el cual $J_1 = J_2 = J$ y $J_3 = J_4 = 0$ meV para una red cuadrada con interacciones de corto alcance, o incluso simular una red triangular en una red cuadrada (o cúbica) haciendo $J_4 = 0$ meV, J_1 , J_2 y $J_3 \neq 0$. Esta posibilidad no es tan evidente como las anteriores e implica una distorsión sin

importancia en la forma de la red que se ilustra Fig. 5.2. Mediante esta configuración también se pueden simular sistemas frustrados.

En adición a estas constantes de intercambio existe otra llamada J_R que representa las interacciones entre planos para el caso tridimensional.

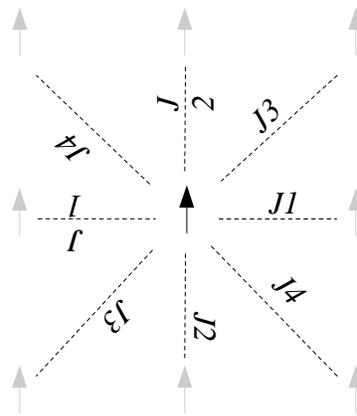


Fig. 5.1 Estructura general de interacciones entre vecinos para dos dimensiones

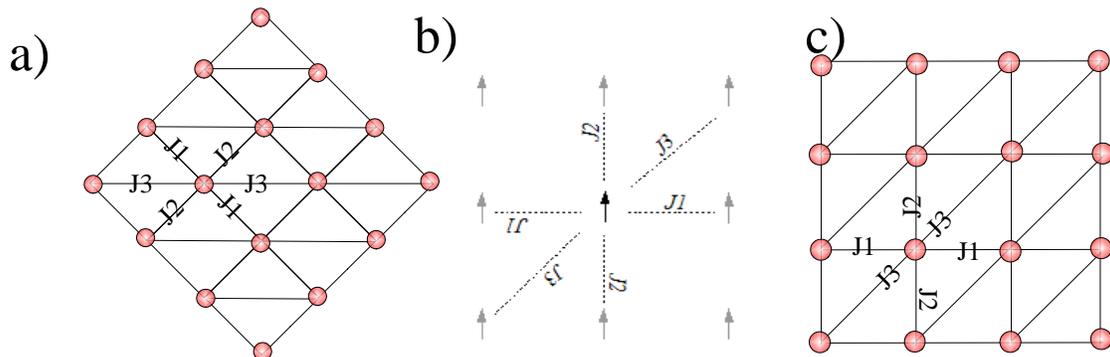


Fig. 5.2 a) Red triangular b) Estructura de interacciones entre vecinos para J_4 nulo c) Red cuadrada equivalente a una red triangular

5.2. MODELO DE ISING EN DOS DIMENSIONES

La variedad y complejidad de ordenamientos magnéticos presentes en las manganitas compuestas por tierras raras han hecho difícil el desarrollo de un modelo que sea válido para todo su rango de concentraciones. El modelo de Ising puede aplicarse a esta familia de

materiales para las concentraciones que presenten un ferromagnetismo y anisotropía muy fuertes. Un ejemplo es el compuesto $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$. Esta simplificación no permite obtener resultados cuantitativamente correctos, sin embargo, el comportamiento magnético y eléctrico es correcto desde el punto de vista cualitativo para algunas concentraciones de esta familia de materiales. El modelo de Ising presenta una transición de fase de paramagnetismo a ferromagnetismo en la temperatura de Curie, T_c .

5.2.1. Resultados

La magnetización por espín para el modelo de Ising en dos dimensiones con $J_1 = J_2 = 60\text{K}$ y una red de 60×60 espines con condiciones periódicas de frontera y varios valores de campo magnético, esta ilustrada en la Fig. 5.3. Se observa una buena similitud con la expresión analítica para campo cero (ver capítulo 2). Como se esperaba, el campo magnético ayuda a orientar a los espines en su propia dirección, incrementando la magnetización.

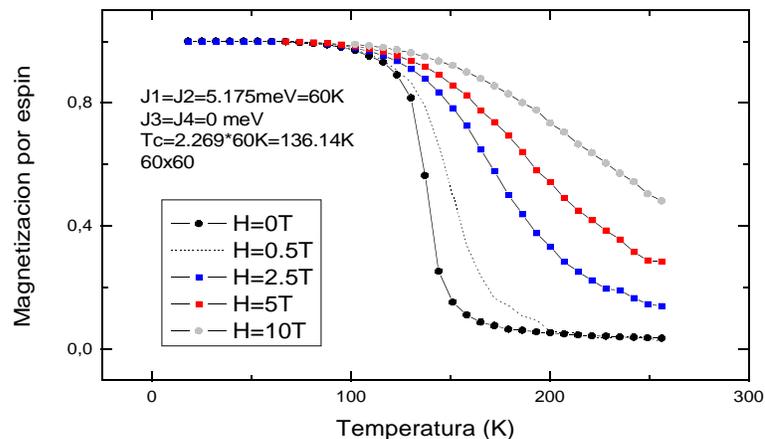


Fig. 5.3 Magnetización por espín para el modelo de Ising en dos dimensiones para varios valores de campo magnético

La susceptibilidad por espín (ver Fig. 5.4) diverge a $T = 137.2\text{K} \pm 3.5\text{K}$, similar a la temperatura crítica para un red infinita ($T_{C(\infty)} \approx 136.14\text{K}$). Para obtener este valor con una precisión razonable a partir de las simulaciones debe disminuirse el paso de temperatura en cercanías a la región crítica y realizar un análisis en base a la teoría de escalamiento finito. Los resultados de un análisis de este tipo no son importantes para los propósitos de este trabajo. A la

temperatura crítica la susceptibilidad debe ser infinita, claramente esto no se puede obtener en una simulación numérica debido al tamaño finito de la red.

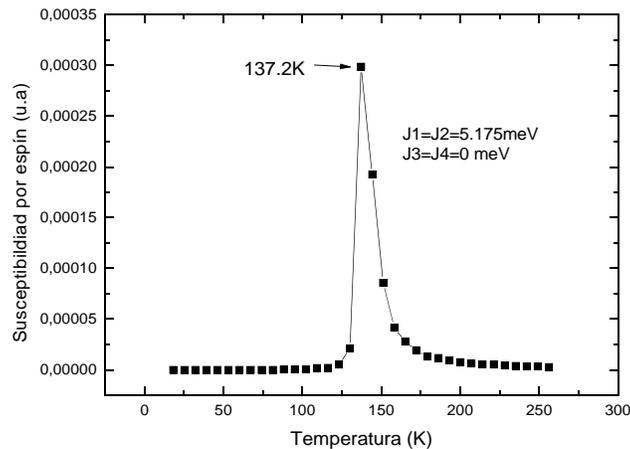


Fig. 5.4 Susceptibilidad por espín para el modelo de Ising en dos dimensiones

5.2.2. Comparación entre varios algoritmos híbridos

Las ventajas de usar algoritmos híbridos se corroboran en esta sección simulando el modelo de Ising con interacciones entre vecinos más cercanos. Para una red cuadrada de 40^2 con $J = J_1 = J_2 = 5,175 \text{ meV} = 60\text{K}$ y $J_3 = J_4 = 0\text{K}$ a campo magnético aplicado cero mediante varios algoritmos híbridos. se ajustó el valor de la constante de intercambio J mediante la curva de magnetización obtenida, con los resultados exactos para el modelo de Ising en dos dimensiones. Los resultados se muestran en el cuadro 5. 1 y en la Fig. 5.5. Es importante anotar que se están comparando los resultados de simulación para un sistema finito con el resultado analítico para una red infinita. Una comparación más rigurosa podría incluir el cálculo del tiempo de correlación para cada algoritmo y la velocidad a la cual genera configuraciones no correlacionadas de espines.

CUADRO 5. 1 Comparación entre varios algoritmos híbridos

Algoritmo	Valor Ajustado de J (K)	Error en el cálculo de $J(\pm)$
Metrópolis	60,15(0)	0,0125(3)
Metrópolis + Diablillo	59,94(4)	0,0203(7)
Metrópolis + Wolff	59,95(7)	0,0086(5)
Metrópolis + Wolff + Diablillo	59,97(3)	0,0138(0)
Wolff + Metrópolis	59,95(7)	0,0086(5)
Wolff + Diablillo	59,90(9)	0,0189(4)
Wolff	59,85(0)	0,0279(0)

Se observa que combinar el algoritmo de Metrópolis con el de Wolff conlleva a mejores resultados que combinar estos algoritmos individualmente con el del diablillo. La mejora en precisión es incluso mejor combinando los tres algoritmos.

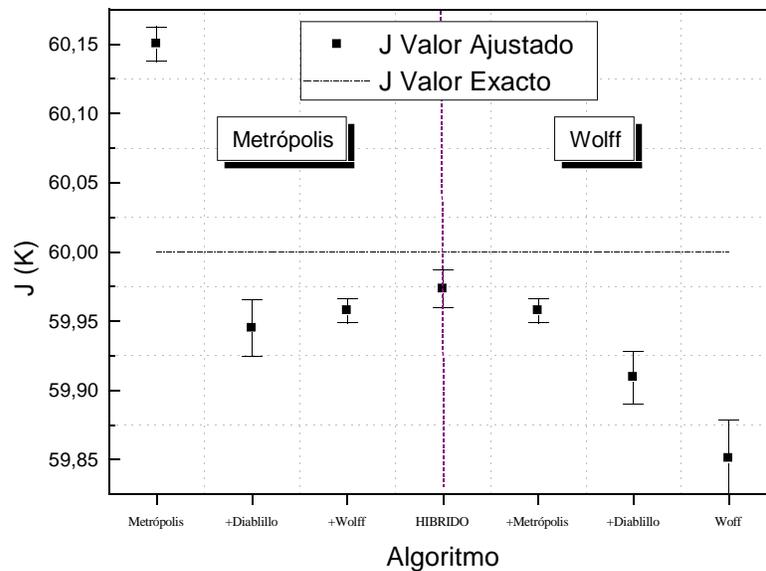


Fig. 5.5 Valor ajustado de J mediante la magnetización para varios algoritmos. La región izquierda de la gráfica tiene como base el algoritmo de Metrópolis, mientras que la parte derecha el algoritmo de Wolff. Híbrido es la combinación de los algoritmos Metrópolis, Wolff y Diablillo.

La Fig. 5.6 corresponde al tiempo que le toma a varios algoritmos simular este sistema. Debe aclararse que este tiempo no es una medida de la eficiencia del algoritmo¹, sino el tiempo que le toma cumplir con el criterio de convergencia. De todos los algoritmos mostrados el más “lento” es el de metrópolis más el diablillo. A pesar de esta aparente deficiencia es el algoritmo más útil, debido a que las combinaciones más rápidas con el algoritmo de Wolff están limitadas a sistemas con campo magnético externo cero, y que el algoritmo de metrópolis por si solo no es nada eficiente generando configuraciones no correlacionadas de espines, lo que en algunos casos puede conducir a resultados erróneos, como el ilustrado en la Fig. 5.7. Para esa simulación se utilizó una configuración inicial de espines desordenada, con igual probabilidad de apuntar en cualquier dirección y se disminuyó la temperatura hasta encontrar la fase ordenada. Este caso ilustra la memoria de largo alcance, la dificultad para simular redes “grandes”, y la poca eficiencia generando configuraciones no correlacionadas de espines del algoritmo de Metrópolis. Incluso usando supercomputadores [1] debe desecharse la configuración inicial mencionada por una uniforme (menos acorde con la fase desordenada) para obtener resultados correctos mediante este algoritmo en tiempos razonables. Sin embargo, estas deficiencias se reducen considerablemente al combinarlo con el algoritmo del diablillo, como se ilustra en la Fig. 5.7.

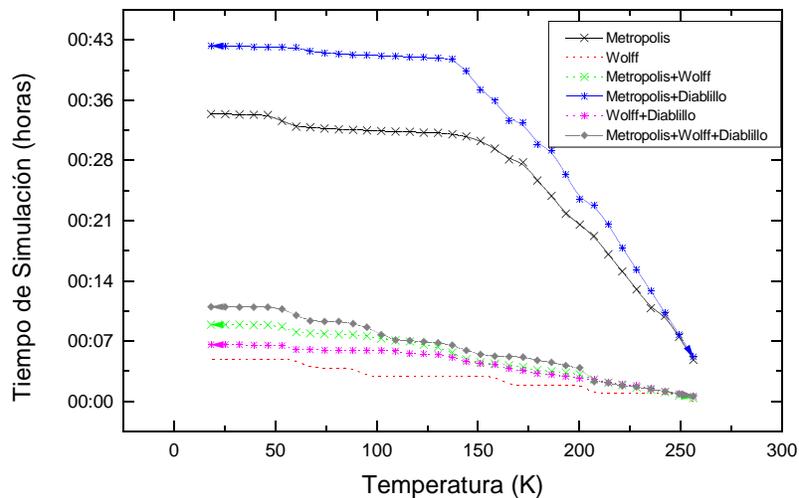


Fig. 5.6 Tiempo de simulación acumulado al bajar la temperatura para varios algoritmos híbridos

1 Para comparar la eficiencia de los diferentes algoritmos, es necesario conocer la velocidad a la cual se toman medidas y el grado en el cual las medidas sucesivas están correlacionadas.

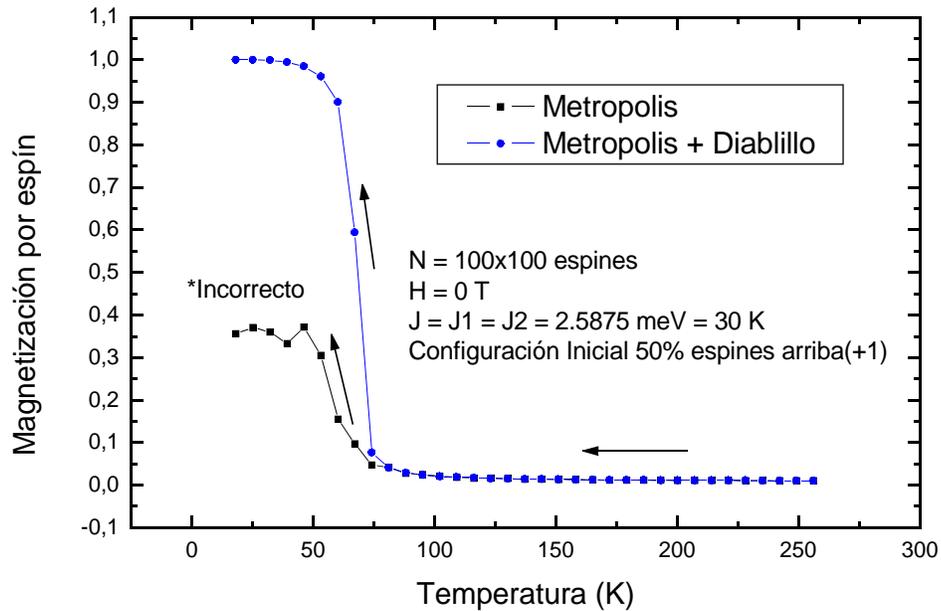


Fig. 5.7 Magnetización por espín en función de la temperatura para una red cuadrada de 100x100 espines.

5.3. MODELO DE ISING EN TRES DIMENSIONES

El modelo de Ising en tres dimensiones no ha sido solucionado analíticamente, y pertenece a uno de los problemas intratables analíticamente en la física (ver apéndice A).

Los resultados de magnetización y energía por espín para este modelo ilustran en las Fig. 5.8 y 5.9. Se observa que al aumentar el campo magnético la energía disminuye y la magnetización aumenta. En campo cero la curva de magnetización es similar al la del caso bidimensional, al reducir la temperatura el sistema tiende a ordenarse pero menos abruptamente.

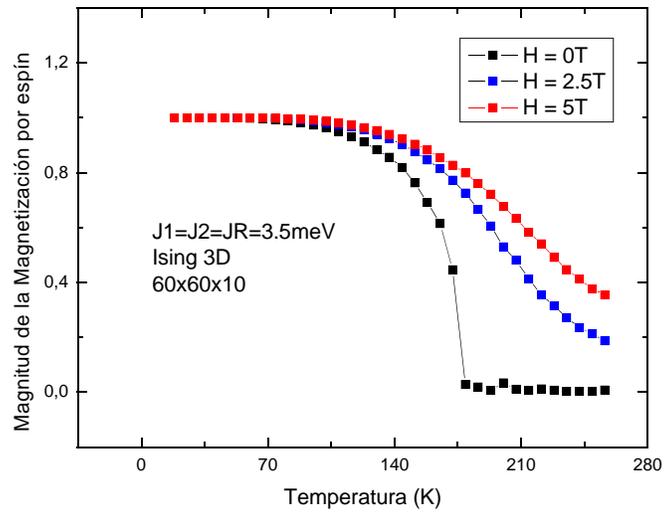


Fig. 5.8 Magnetización por espín para el modelo de Ising en tres dimensiones

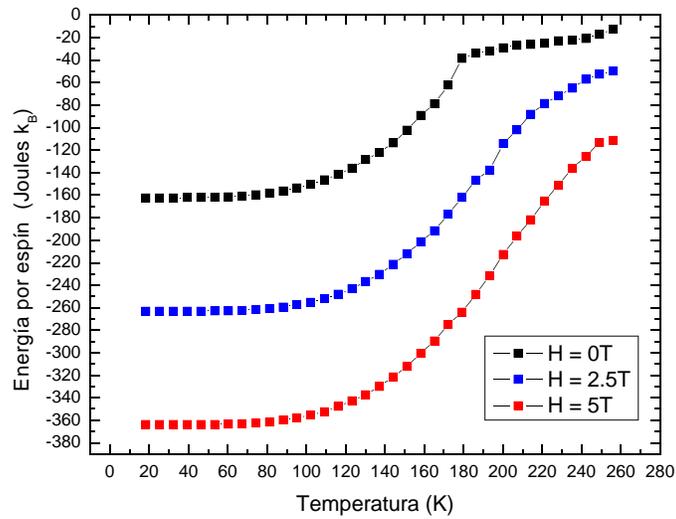


Fig. 5.9 Energía por espín para el modelo de Ising en tres dimensiones

La susceptibilidad por espín se ilustra en la Fig. 5.10, indicando una transición de fase de ferromagnético a paramagnético a una temperatura cercana a $172.2\text{K} \pm 3.5\text{K}$, aproximadamente 4.25J . Esta transición se presenta en dos dimensiones a aproximadamente 2.269J .

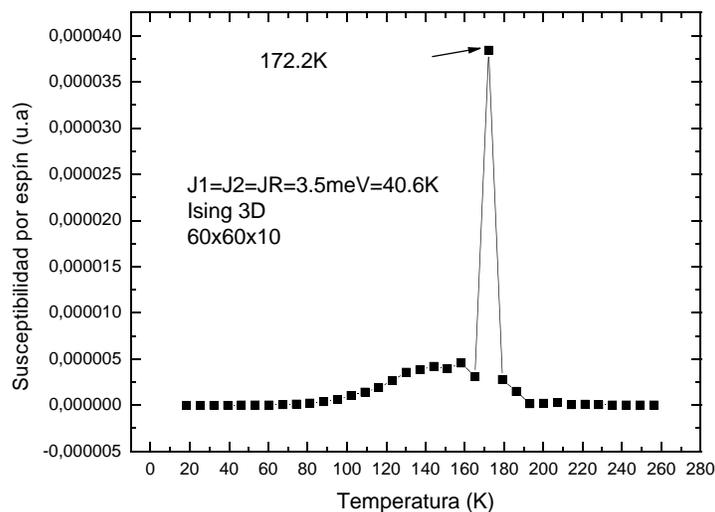


Fig. 5.10 Susceptibilidad por espín en una red tridimensional con $J = J_1 = J_2 = 3.5 \text{ meV}$

5.4. MODELO DE KRONIG-PENNEY-ISING

Como se mencionó anteriormente una de las suposiciones de este modelo es considerar más relevante las correlaciones entre los estados magnéticos que los efectos de la distorsión de red para obtener las características de la magnetorresistencia colosal. A pesar de la sencillez de este modelo muchas de las características cualitativas de la magnetorresistencia colosal en las manganitas compuestas por tierras raras se reproducen satisfactoriamente. Los resultados de resistividad que se muestran en esta sección fueron obtenidos mediante el método desarrollado en este trabajo (ver capítulo 4).

5.4.1. Magnetorresistencia Colosal

La resistividad para un sistema bidimensional tipo Ising en función de la temperatura y para varios valores de campo, se ilustra en la Fig. 5.11. Se observa un máximo en la resistividad en las cercanías de la temperatura crítica, que es de 250 K . El comportamiento obtenido se ajusta cualitativamente bien a los resultados experimentales para esta familia de compuestos.

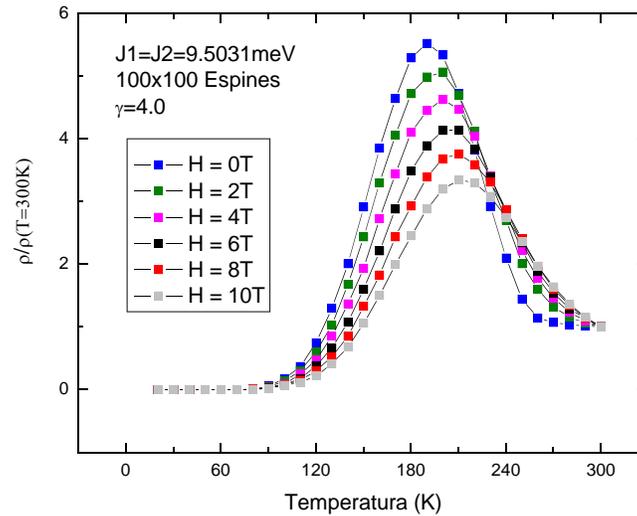


Fig. 5.11 Resistividad en función de temperatura para varios valores de campo magnético

Las propiedades cualitativas de la magnetorresistencia colosal en las manganitas se reproducen aproximadamente bien en el modelo de Kronig-Penney-Ising, sin embargo los resultados experimentales (ver capítulo 1), indican que el máximo de la resistividad ocurre exactamente en la temperatura de transición T_c , que es aproximadamente 250K para el sistema ilustrado en la Fig. 5.12, mientras que el pico de la resistividad se manifiesta alrededor de 190K. Esta es una de las características del modelo de Kronig-Penney-Ising que se elucida mediante el nuevo método desarrollado en este trabajo. Una explicación de por qué este fenómeno ocurre en este modelo y de por qué la solución tipo Monte Carlo no la revela se presenta más adelante.

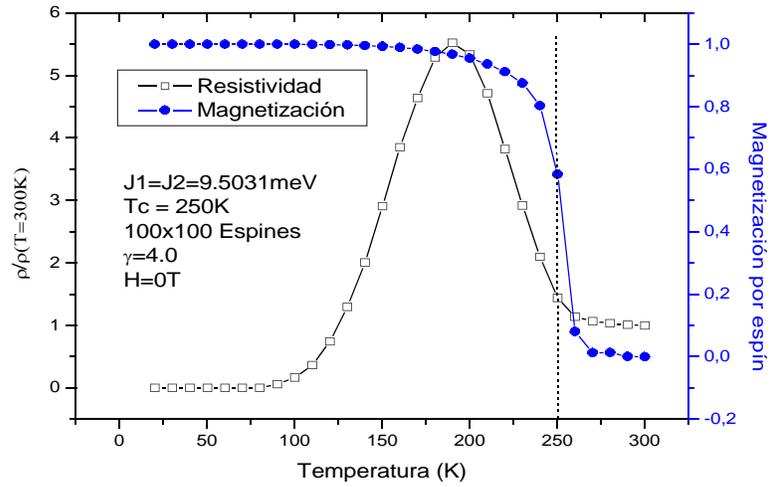


Fig. 5.12 Magnetización y Resistividad en función de temperatura. La línea punteada indica la temperatura de transición ferromagnética-paramagnética T_c

La Fig. 5.13 ilustra el comportamiento de la magnetorresistencia en función del campo magnético aplicado. Se observa, en concordancia con los resultados experimentales para algunos compuestos como el $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ (ver capítulo 1), que la magnetorresistencia incrementa con el logaritmo del campo aplicado.

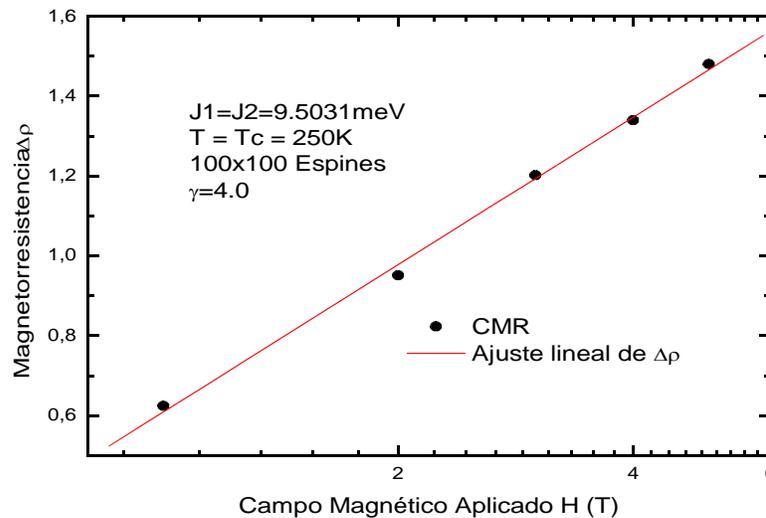


Fig. 5.13 Magnetorresistencia en función del campo aplicado H . La gráfica es semilogarítmica

5.4.2. Caso en tres dimensiones

El comportamiento de la resistividad en tres dimensiones es muy similar al bidimensional. Se observa que el máximo de la resistividad disminuye su valor y se desplaza hacia temperaturas mayores con el incremento del campo magnético aplicado. Esta disminución es mayor en comparación con el caso bidimensional, más acorde con los resultados experimentales.

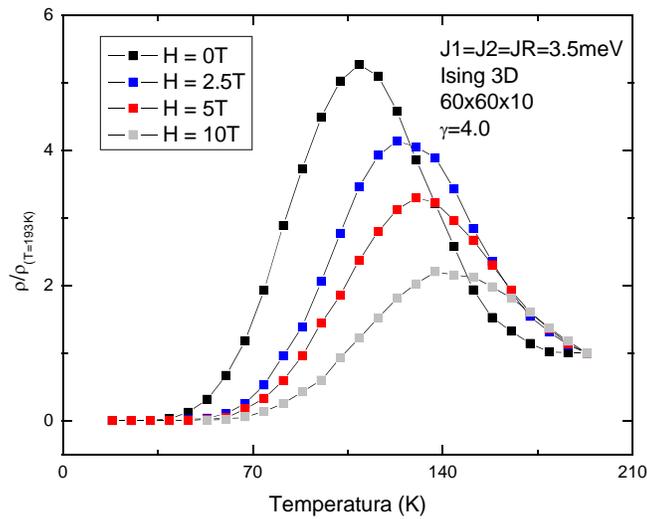


Fig. 5.14 Resistividad en función de temperatura para varios valores de campo en una red tridimensional

5.4.3. Efectos al variar algunos parámetros del sistema

Al variar el parámetro γ se observa que la temperatura en la cual ocurre el pico de la magnetorresistencia no varía para valores mayores a 3, manteniéndose alrededor de 105K para el sistema bidimensional que se ilustra en las Figs. 5.15 y 5.16. Mientras que para valores menores se observa un pequeño corrimiento en este pico hacia temperaturas mayores, debido a que la magnitud de las barreras de potencial es muy pequeña. La dificultad para atravesar las barreras de potencial se hace mayor para valores de γ más grandes, por lo que el pico de la magnetorresistencia se hace mayor. El parámetro γ no tiene ningún efecto en los tiempos de simulación, por lo que puede simularse para valores muy grandes sin inconvenientes, al contrario que en las simulaciones realizadas por R. Lillis [1], en las cuales se descartó la

posibilidad de simular para valores de γ mayores a 1.0 debido al incremento dramático en los tiempos de simulación.

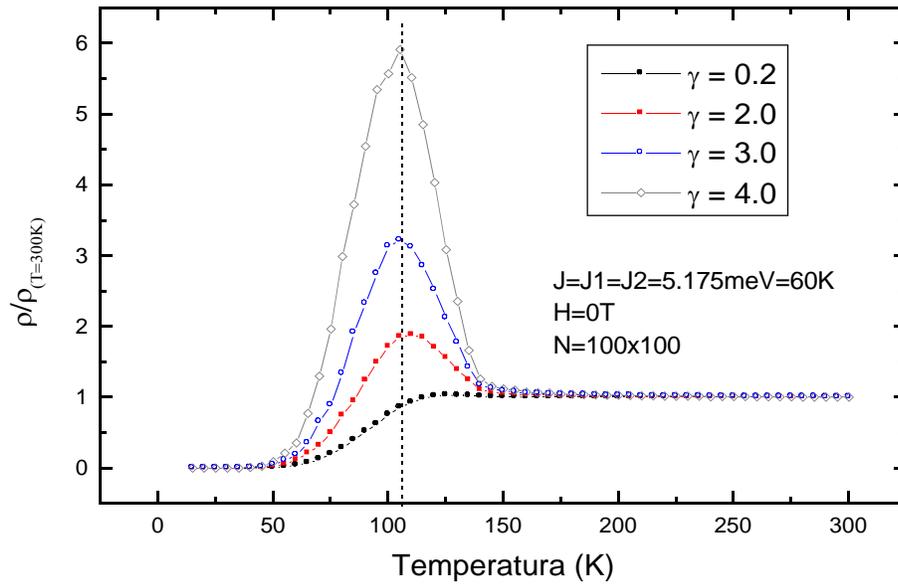


Fig. 5.15 Resistividad en función de la temperatura para varios valores de γ menores a 4

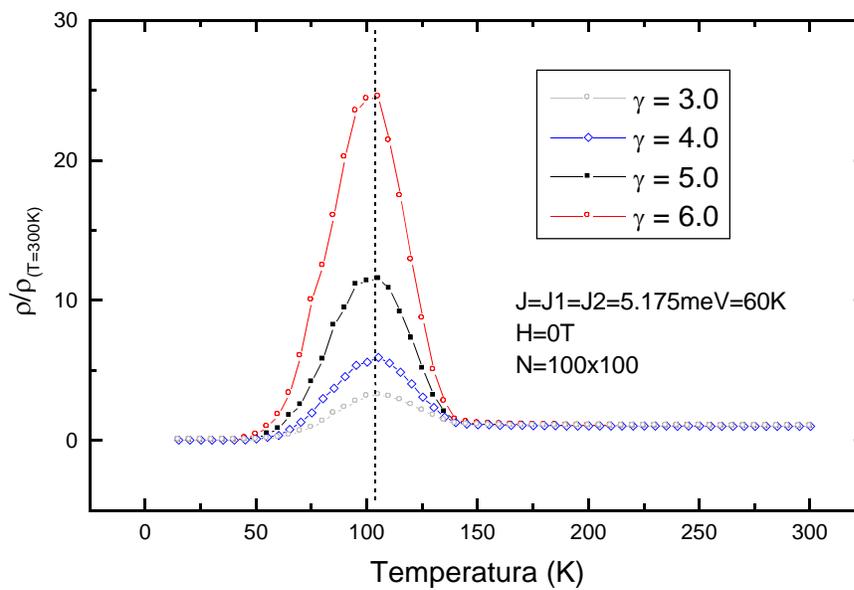


Fig. 5.16 Resistividad en función de la temperatura para varios valores de γ mayores a 4

Un parámetro que se elimina mediante el método exacto para el modelo de Kronig-Penney-Ising, es la razón $\frac{\text{pasos de Monte Carlo}}{\text{No. saltos electrónicos}}$ que usa R. Lillis [1] y que afecta enormemente la calidad de los resultados. Se comprobó en este trabajo que los resultados obtenidos por este nuevo método son invariantes a dicha razón.

5.4.4. Efectos de Tamaño Finito

En la Fig. 5.17 se ilustra el efecto del tamaño de la red en la magnetorresistencia en sistemas bidimensionales. Se observa que al aumentar el número de espines en el sistema, el pico máximo de la magnetorresistencia se manifiesta a temperaturas menores y los resultados son mucho menos “ruidosos”.

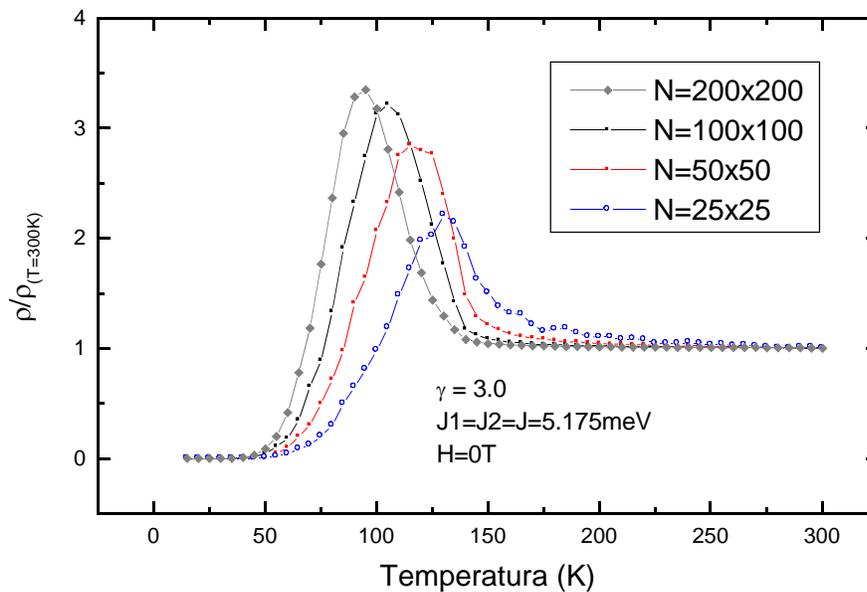


Fig. 5.17 Efecto del tamaño de la red en la resistividad en función de la temperatura

5.4.5. Comparación Numérica entre la solución de Monte Carlo y la exacta para la magnetorresistencia

En este apartado se demuestra que la simulación del modelo de Kronig-Penney-Ising para la magnetorresistencia mediante el nuevo método descrito en el capítulo 4 permite una mejora sustancial en los tiempos de simulación y en la precisión de los resultados obtenidos en comparación con los reportados en la Ref. [1]. Se denominará solución de Monte Carlo a los resultados obtenidos mediante el método usado en dicha referencia y solución exacta a los resultados calculados por medio de las expresiones para la resistividad deducidas anteriormente. Es evidente que la solución exacta provee resultados más confiables en mucho menor tiempo, sin embargo, para tener una idea de la diferencia de tiempo de simulación y precisión entre ambos métodos, se simuló numéricamente una red unidimensional para la configuración de espines indicada en la Fig. 5.18. Para esta configuración existen dos clusters (región $L1$ y $L2$) y dos barreras de potencial eléctrico formadas por las paredes magnéticas que separan los dos clusters ($L1-L2$ y $L2-L1$). Los electrones se envían desde la parte izquierda de la red y una vez la atraviesan, regresan al sitio inicial para ser lanzados de nuevo. Se mantendrá $L1$ constante (tres espines orientados hacia “arriba”) y se variará la longitud $L2$ manteniendo los espines orientados hacia “abajo” con el propósito de evaluar el comportamiento de ambos métodos en barreras de potencial de diferentes tamaños.

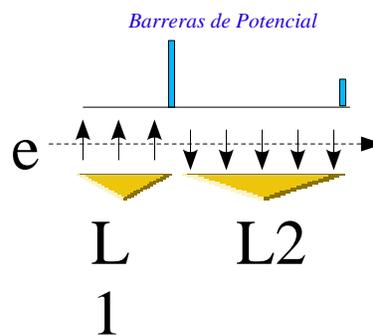


Fig. 5.18 Proceso de magnetotransporte en una red unidimensional de $(L1+L2)$ espines

5.4.5.1. Solución de Monte Carlo

El algoritmo utilizado en este caso se resume así: El electrón avanza libremente dentro de la región L1. Al encontrar la barrera de potencial entre L1-L2 se calcula un número aleatorio entre 0 y 1. Si este número es menor que $p = \exp(-\gamma L_2)$ el electrón se desplaza hacia la región L2 en donde puede avanzar libremente, hasta que encuentra de nuevo la pared magnética L2-L1. Se genera un número aleatorio nuevamente y si este número es menor que $p = \exp(-\gamma L_1)$ se retorna al primer sitio de la red y se prosigue de la misma manera hasta obtener la precisión deseada. Mediante este procedimiento se obtuvieron las Figs. 5.19 y 5.21 para una precisión deseada de 10^{-4} . Se observa que los tiempos de simulación aumentan de forma aproximadamente exponencial al incrementar L2. Esto implica tiempos de simulación extremadamente grandes para simular el modelo de Kronig-Penney-Ising especialmente en temperaturas cercanas a la temperatura crítica en donde el tamaño de los clusters es máximo. También se observa que utilizar valores de γ mayores a 0.5 incluso para redes pequeñas (por ejemplo, 4000 espines) requiere de computadores específicamente diseñados para realizar cálculos numéricos².

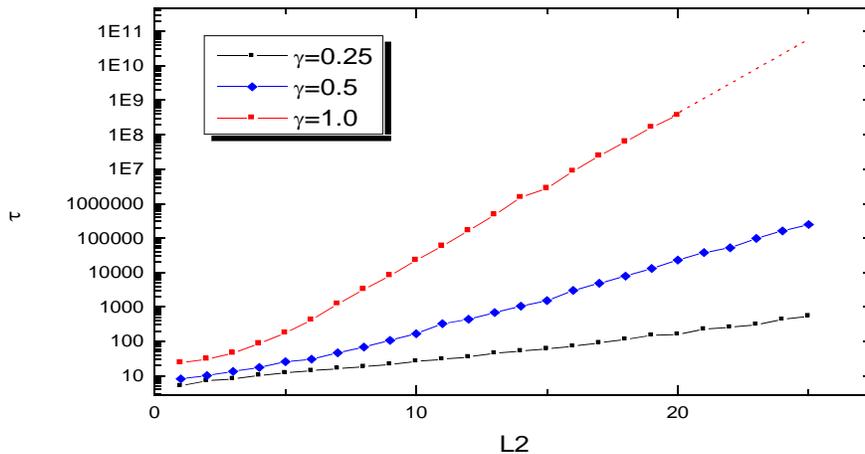


Fig. 5.19 Solución de Monte Carlo para τ en función del tamaño de cluster L2 para varios valores de γ

- 2 Para la red unidimensional tratada en esta sección, τ tomó 12 horas en calcularse en un computador personal AMD Athlon de 1.1 GHz para $L_2 = 20$ y $\gamma = 1.0$. En este caso no se simulaban valores más grandes de L_2 , debido a que el incremento en este tiempo es exponencial. !Se estimó un tiempo de **31.7 años** en calcular τ para $L_2 = 30$ y $\gamma = 1.0$ para una precisión de 10^{-4} !

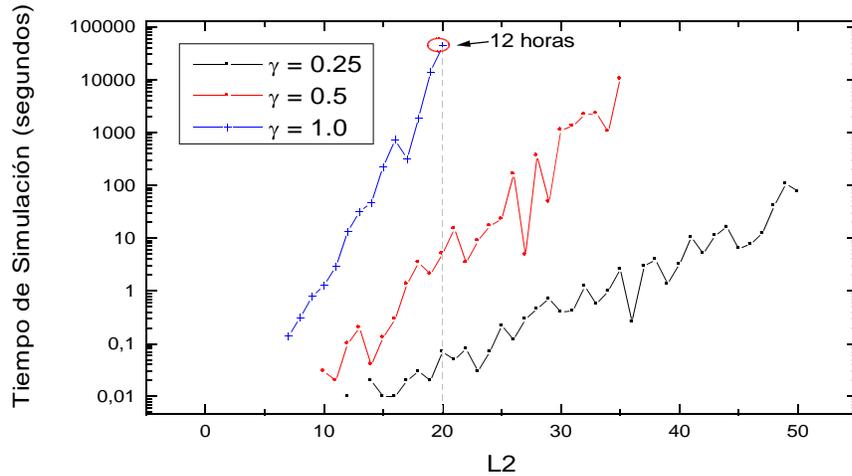


Fig. 5.20 Tiempo de simulación en función de L2 para varios valores de γ

5.4.5.2. Solución Exacta

Para la configuración tratada en esta sección, el tiempo promedio que le toma al electrón cruzar la red viene dado por la siguiente expresión,

$$\tau = (L1 + L2) + \sum_{i=1}^2 (\exp(\gamma L_i) - 1) \quad (5.1)$$

Los resultados al aplicar la solución exacta variando L2 se ilustran en la Fig. 5.21. Se observa que τ aumenta exponencialmente al incrementar L2 para distancias mayores a 5 unidades, y que al aumentar γ , se incrementa la pendiente de τ contra L2. Los tiempos de simulación observados se muestran en la Fig. 5.22, para la cual cada punto demora tan solo un poco más de 2μ segundos en calcularse. No se observa una variación significativa en este tiempo al aumentar L2 y/o γ .

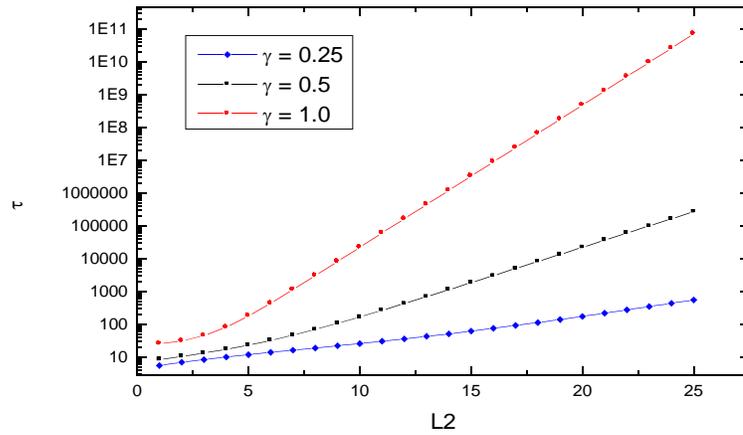


Fig. 5.21 Solución exacta para τ en función del tamaño de cluster $L2$ para varios valores de γ

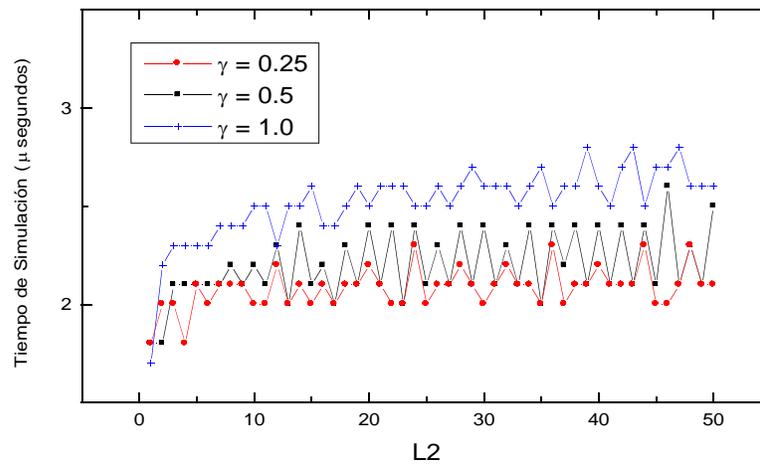


Fig. 5.22 Tiempo de simulación en función de $L2$ para varios valores de γ

5.4.5.3. Comparación entre ambas soluciones

La comparación gráfica entre ambas soluciones (ver Fig. 5.23) verifica que ambos métodos conducen al mismo resultado. Sin embargo, las diferencias son gigantescas en cuanto a los tiempos de simulación como se observa al comparar las Figs. 5.21 y 5.22. En el mejor de los casos ($\gamma = 0.25, L2 = 1$) la solución de Monte Carlo tarda 13.3 milisegundos en simularse, mientras que la solución exacta demora 1.8 microsegundos, es decir aproximadamente 7400 veces más rápida que la de Monte Carlo. Para $\gamma = 1.0$ y $L2 = 20$, la solución de Monte Carlo

tarda 59100 segundos mientras que la exacta tan solo 2.5 microsegundos, o sea que la última es 2.4×10^{10} veces más rápida. Se estima que la diferencia es muchísimo más dramática al seguir aumentando γ y/o $L2$, dado que este tiempo parece aumentar exponencialmente como lo ilustra la Fig. 5.21.

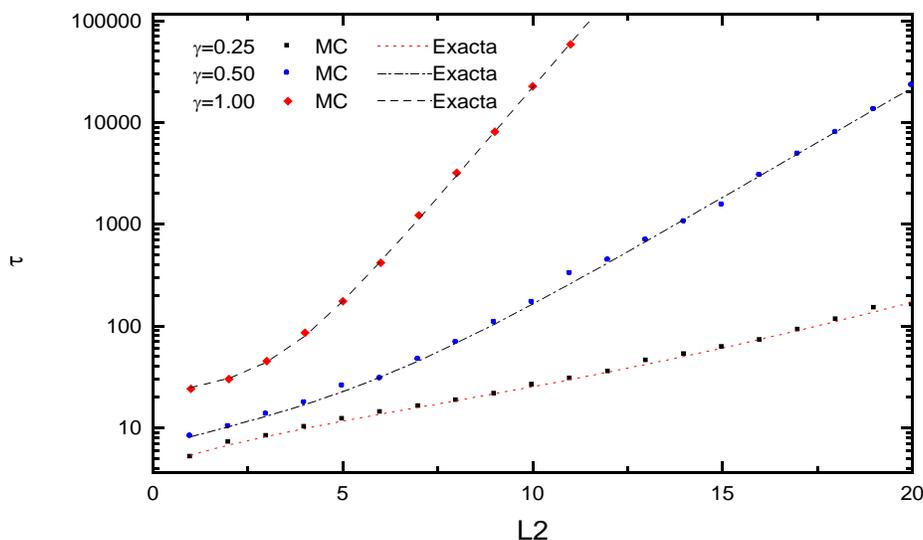


Fig. 5.23 Superposición entre la solución de Monte Carlo (MC) y la Exacta para τ en función de $L2$

Los tiempos de simulación necesitados por la solución de Monte Carlo para obtener la precisión deseada son enormes, incluso utilizando computadores diseñados específicamente para realizar cálculos numéricos eficientemente -como el usado en la Ref. [1]- debe limitarse el tamaño de la red y el valor de γ para obtener resultados confiables en tiempos razonables. Pese a las restricciones de la solución de Monte Carlo, debe aclararse que esta puede ser usada para obtener resultados relativamente confiables en tiempos y condiciones razonables en computadores personales, como las realizadas por el autor en las Refs. [3] y [4].

Claramente se observa que las ventajas de la solución exacta son abrumadoras frente a la de Monte Carlo en términos de tiempo de simulación y precisión, de esta manera, la dificultad para simular el modelo de Kronig-Penney-Ising mediante el método exacto queda prácticamente reducida a la dificultad para simular el modelo de Ising.

5.4.6. Discrepancia entre T_c y la temperatura del máximo de resistividad

Se argumenta en la Ref. [1] que uno de los elementos fuertes del modelo de Kronig-Penney-Ising es la reproducción del pico de resistividad que se manifiesta en la temperatura de transición T_c -en este caso, de ferromagnético a paramagnético- en las manganitas compuestas por tierras raras, y que eso se debe a que el tamaño de los clusters es mayor en dicha temperatura. Los resultados obtenidos en este trabajo mediante el “método exacto” no coinciden con dicho argumento, pues el máximo de la resistividad se presenta a una temperatura menor que T_c . En un trabajo previo [3] sí se obtuvo esta coincidencia mediante un algoritmo similar al de Lillis [1] pero optimizado, cuyo resultado se ilustra en la Fig. 5.24. La temperatura de transición ocurre a $T_c = 2.269K$, exactamente en donde ocurre el pico máximo de la resistividad. En realidad, esta anomalía no es una deficiencia del método exacto sino del modelo de Kronig-Penney-Ising, que difícilmente puede ser elucidada mediante un algoritmo de Monte Carlo. A continuación se demuestra esta afirmación numéricamente.

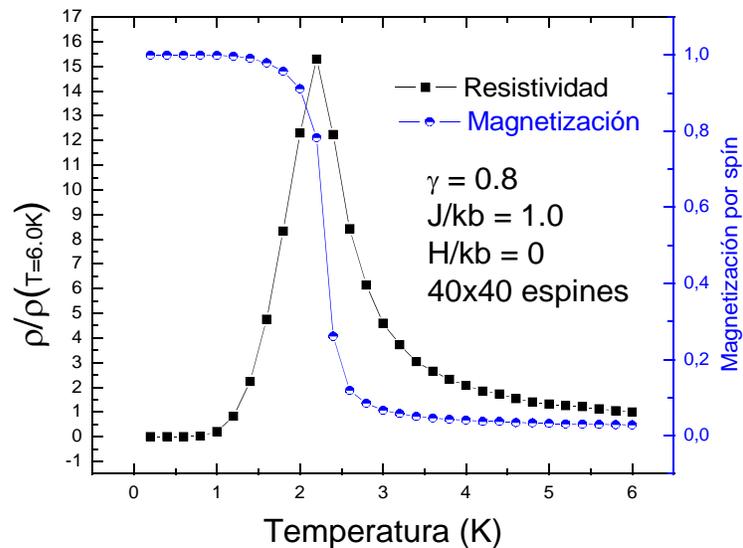


Fig. 5.24 Resistividad en función de la temperatura para varios valores de campo. La simulación de la resistividad se obtuvo mediante un método de Monte Carlo [3].

5.4.6.1. Prueba numérica

La Fig. 5.25 ilustra el tamaño promedio de las barreras de potencial para un sistema tipo Ising con 80^2 espines. La simulación se realizó para una constante de intercambio igual a 5.175meV (60K), para la cual la solución exacta del modelo de Ising predice una temperatura de transición para una red infinita igual a 136.14K . Se ajustó la magnetización obtenida mediante simulación con el resultado exacto (ver capítulo 2) usando como parámetro de ajuste la constante de intercambio, que resultó igual a 59.988K . Este resultado predice $T_c = 2.269 \times 59.988\text{K} = 136.11\text{K}$. El tamaño promedio de las barreras de potencial presenta un máximo a una temperatura menor a T_c e igual 105.2K , exactamente en donde la resistividad estimada (ver capítulo 4) presenta su máximo.

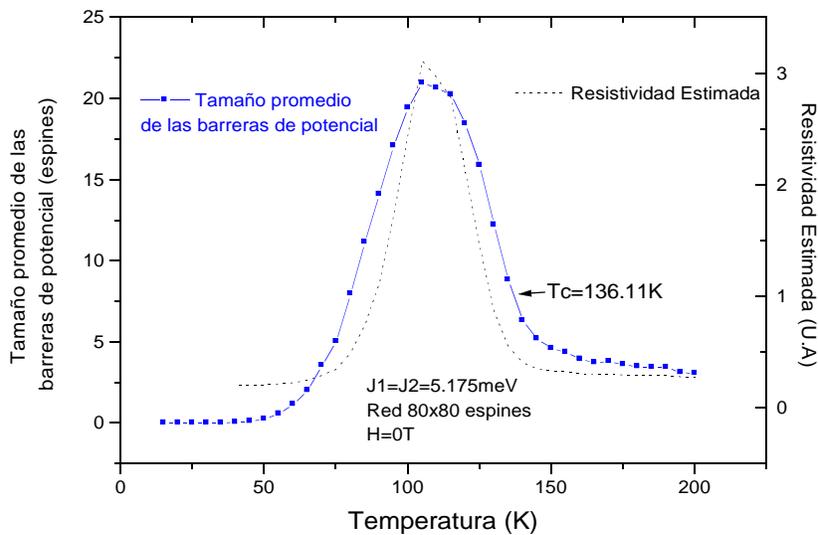


Fig. 5.25 Tamaño promedio de las barreras de potencial y resistividad estimada para una red cuadrada tipo Ising

Para ilustrar porque el tamaño de las barreras de potencial es máximo en 105K se muestra la configuración de espines típica para algunas temperaturas en la Fig. 5.26. De las cuatro regiones que representan estas configuraciones se observa:

- **Región I.** El sistema está ordenado ferromagnéticamente. No se presentan barreras de potencial por lo tanto se espera una resistividad muy pequeña.

- **Región II.** El sistema está casi ordenado. Se presenta la combinación de barreras de potencial pequeñas (1 o 2 espines) con barreras de potencial casi del tamaño de la red (~60 espines). Se espera una resistividad muy alta debido a que ésta aumenta exponencialmente con el tamaño de las barreras de potencial.
- **Región III.** El sistema se encuentra en una región crítica. Las barreras de potencial son grandes (~10 espines) y aproximadamente todas presentan el mismo tamaño. Se espera una resistividad alta pero no tan alta como en la región II.
- **Región IV.** El sistema está desordenado. El tamaño de las barreras de potencial es pequeño (~1 o 2 espines).

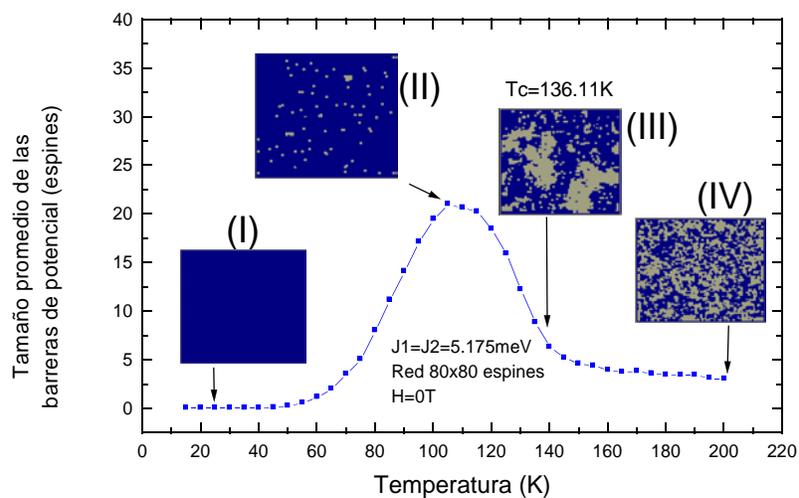


Fig. 5.26 Tamaño promedio de las barreras de potencial y configuración de la red para varias temperaturas

En este punto no es claro porque la solución de Monte Carlo para el modelo de Kronig-Penney-Ising presenta el máximo de resistividad exactamente en T_c . Por esa razón se ha simulado el sistema unidimensional mostrado en la Fig. 5.18 con 16 espines y se ha puesto a prueba la solución de Monte Carlo para dos casos representativos a la región crítica (caso 1) y la región en donde las barreras de potencial son en promedio máximas (caso 2) para dos valores distintos de γ .

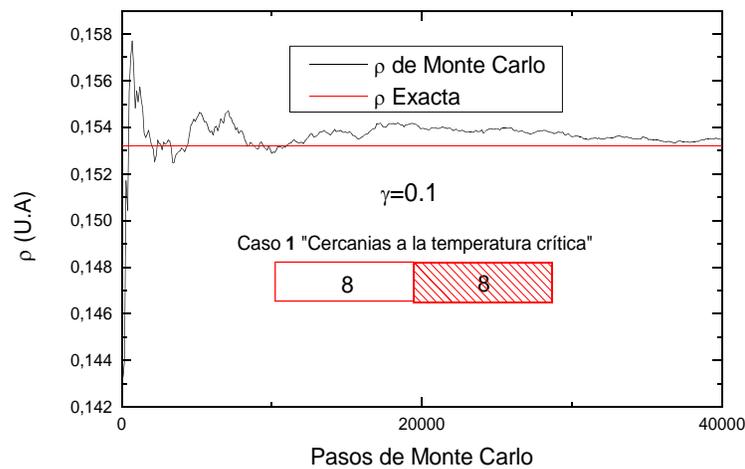


Fig. 5.27 Resistividad en función de los pasos de Monte Carlo para el caso 1

La resistividad en el caso 1 (Fig. 5.27) con 2 regiones de 8 espines cada una, alcanza aproximadamente su valor exacto en pocos pasos de Monte Carlo (cercano a 10000) para $\gamma = 0.1$. Lo mismo sucede para el caso 2 (dos regiones formadas por 1 y 15 espines, Fig. 5.28) con $\gamma = 0.1$, pero una aproximación razonable solo se alcanza a los 40000 pasos de Monte Carlo. Se concluye que para $\gamma = 0.1$ la solución de Monte Carlo puede conducir a resultados correctos. De hecho la simulación realizada por R. Lillis [1] que se muestra en la Fig. 5.29 también presenta un máximo en la resistividad en una temperatura menor que la crítica, que es de 150K, para valores de γ menores a 0.2.

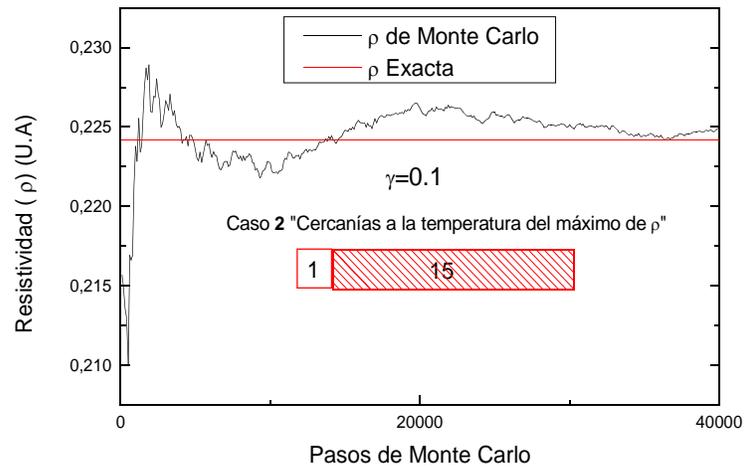


Fig. 5.28 Resistividad en función de los pasos de Monte Carlo para el caso 2

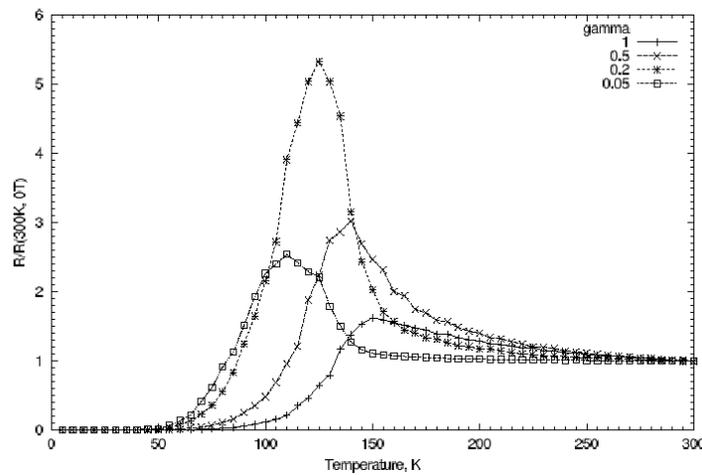


Fig. 5.29 Resistividad en función de Temperatura para varios valores de γ . Tomada de Ref. [1]

Para valores de γ mayores a 0.1, la magnitud de la barrera de potencial impide que los electrones la atraviesen lo suficiente como para obtener resultados estadísticos confiables. La resistividad para los dos casos con $\gamma = 1.0$ se ilustra en la Fig. 5.30. La resistividad para el caso de las cercanías a la temperatura crítica (caso 1) sí se aproxima a su valor exacto en pocos pasos de Monte Carlo, mientras que para el caso 2, 40000 pasos de Monte Carlo producen un valor que es escasamente el 1% del valor exacto. Esta situación es incluso más crítica para pasos de Monte Carlo menores a 5000, pues la resistividad del caso 1 es

incorrectamente mayor a la del caso 2, como se ilustra en la región encerrada por el círculo de la Fig. 5.30, y su efecto acumulado en una simulación del modelo de Kronig-Penney-Ising produce resultados que no son confiables como que el máximo de resistividad ocurra en T_c .

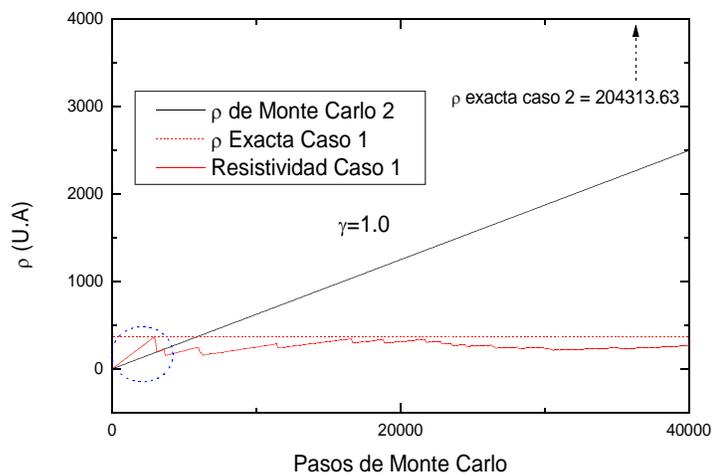


Fig. 5.30 Resistividad en función de los pasos de Monte Carlo para los casos 1 y 2 con $\gamma = 1.0$

Se concluye que el modelo de Kronig-Penney-Ising presenta un máximo en la resistividad a una temperatura menor a la temperatura crítica, como correctamente lo indican las simulaciones de resistividad realizadas mediante el método exacto desarrollado en este trabajo. La coincidencia de ambas temperaturas que se obtiene mediante el método tipo Monte Carlo, es de hecho un resultado incorrecto debido a que el número de pasos de Monte Carlo necesarios para simular un sistema bidimensional tipo Ising requiere un tiempo de simulación muy grande, incluso de años para redes relativamente grandes, aún usando supercomputadores.

5.5. MODELO DE HEISENBERG FRUSTRADO

Recientemente se ha propuesto [5] un modelo basado en el modelo de Heisenberg tridimensional para una red triangular con frustración para modelar el ordenamiento tipo polarón de Zener. A pesar de que este modelo está en una etapa inicial de desarrollo es capaz

de reproducir algunos de los fenómenos experimentales no explicados por los modelos magnéticos anteriores para las manganitas, por ejemplo la anomalía que se presenta en la susceptibilidad magnética en la temperatura de ordenamiento de carga (T_{CO}). En esta sección se muestra el ordenamiento obtenido en este modelo mediante la simulación numérica de una red de $40 \times 40 \times 10$ espines, usando las técnicas de simulación desarrolladas en los capítulos anteriores, y la estructura general de interacciones entre vecinos. Se usaron las interacciones de intercambio calculadas en la Ref. [5] para el $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$, estas son: $J_1 = 14 \text{ meV}$, $J_2 = 12 \text{ meV}$, $J_3 = -5 \text{ meV}$, $J_4 = 0 \text{ meV}$, $J_R = -8 \text{ meV}$. Estos valores corresponden a un sistema con frustración en el cual los vecinos más cercanos interactúan ferromagnéticamente y los siguientes vecinos antiferromagnéticamente, además de presentar interacciones antiferromagnéticas entre planos. En la Fig. 5.31 se ilustran algunas configuraciones obtenidas mediante la simulación de este modelo. Se observa que en la Fig. 5.31b un ordenamiento magnético complejo similar al antiferromagnetismo CE.

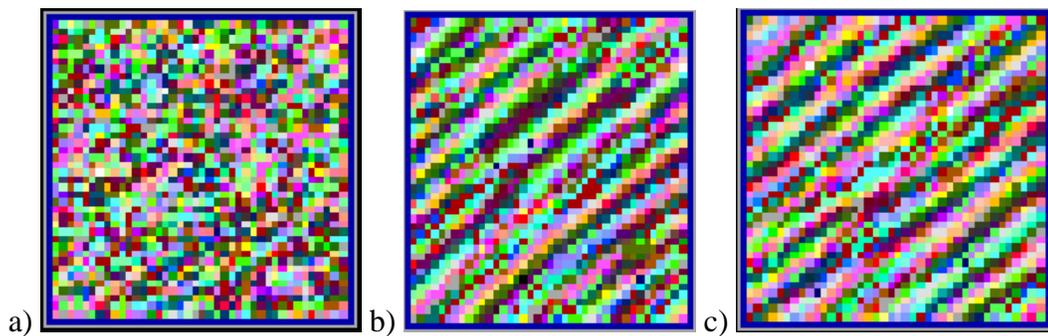


Fig. 5.31 Configuraciones de Espines para el modelo de Heisenberg frustrado. a) Sistema desordenado. b) Configuración a temperatura baja c) Temperatura baja y campo 5T. Los colores significan la orientación del espín y están codificados en el formato RGB (Red, Green, Blue).

5.6. REFERENCIAS

- [1] R. Lillis. *Ising Model Simulation of the Conductive Properties of Mixed Valence Manganites*. Dirección de internet: <http://www.maths.tcd.ie/~robbs/report.pdf> (2001)

- [2] N. Vaudewalle, M. Ausloos, and R. Cloots. Phys. Rev. B. vol. **59**, p. 909 (1999)
- [3] J. F. Reina and A. Rosales-Rivera. *A Four-Sublattice Ising Antiferromagnet Model: Application to the $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ Manganites*. International Conference On Magnetism Abstracts ICM 2003 (2003)
- [4] J. F. Reina and A. Rosales-Rivera. *Magnetic behavior of $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ manganites*. International Conference On Magnetism Abstracts ICM 2003 (2003)
- [5] N.P. Konstantinidis, C.H. Patterson. Cond-mat/0311197 (2003)

6. CONCLUSIONES

- Se simuló el modelo de Ising para redes cuadradas de hasta 200x200 espines mediante un método híbrido que permite la combinación de dos métodos de Monte Carlo para el ensamble canónico, el algoritmo de Metrópolis y el de Wolff, y otro método de Monte Carlo para el ensamble microcanónico, el algoritmo del Diablillo. Se demostraron las ventajas de utilizar este método híbrido en la precisión y eficiencia de los resultados de simulación. Sin los cuales los resultados obtenidos en este trabajo hubiesen sido muy difíciles de obtener mediante un computador personal.
- Se halló una expresión analítica para la resistividad de una configuración de espines de acuerdo al modelo de Kronig-Penney-Ising para las manganitas compuestas por tierras raras. Esta expresión permitió el desarrollo de un método de simulación para hallar la resistividad que combina la solución analítica para la resistividad y la dinámica de Monte Carlo para el modelo de Ising.
- Se comprobó que las ventajas de la “solución exacta” para la resistividad son abrumadoras frente a la de Monte Carlo en términos de tiempo de simulación y precisión, de esta manera, la dificultad para simular el modelo de Kronig-Penney-Ising mediante el método exacto queda prácticamente reducida a la dificultad para simular el modelo de Ising.
- El modelo de Kronig-Penney-Ising presenta un máximo en la resistividad a una temperatura menor a la temperatura crítica, como lo indican las simulaciones de resistividad realizadas mediante el método exacto desarrollado en este trabajo y en aparente contradicción con la solución de Monte Carlo para este modelo. La coincidencia de ambas temperaturas que se obtiene para valores de γ relativamente grandes (mayores a 0.5)

mediante el método tipo Monte Carlo, como se demostró, es un resultado incorrecto, debido a que el número de pasos de Monte Carlo necesarios para simular este modelo requiere un tiempo de simulación tan largo que incluso en supercomputadores puede ser de varios años.

7. PERSPECTIVAS

El interesante tema de las manganitas parece estar apenas encontrando soluciones a diferencias conceptuales que se han tenido desde hace 50 años. Los nuevos descubrimientos están revelando ordenamientos magnéticos que bien podrían presentarse en otros compuestos pero que en ninguno se manifiesta tan claramente como en las manganitas compuestas por tierras raras. Los nuevos conceptos son tan recientes que abren un mundo nuevo de posibilidades desde el punto de vista teórico. Podría decirse que está comenzando una nueva etapa y que el camino por recorrer es todavía mayor al recorrido. Lo último es cierto también desde el punto de vista de simulación numérica.

Puntualmente se puede seguir investigando en los siguientes temas:

- Simulación numérica del polarón de Zener mediante el modelo de Heisenberg tridimensional en una red triangular con frustración.
- Mejoras al modelo de Kronig-Penney-Ising, para describir cuantitativamente y cualitativamente mejor la magnetorresistencia colosal.
- Expandir el modelo de Kronig-Penney-Ising a otros modelos magnéticos, por ejemplo el modelo de Kronig-Penney-Heisenberg.

A. IDENTIFICACION DE UN PROBLEMA INTRATABLE EN LA FISICA. EL MODELO DE ISING EN TRES DIMENSIONES

La información que se muestra a continuación es una traducción de la página web: http://www.er.doe.gov/Sub/Accomplishments/Decades_Discovery/72.html.

Algunos problemas simplemente no pueden ser resueltos. Uno de esos problemas fue identificado en el año 2000 por el biólogo informático *Sorin Istrail* en los laboratorios *Sandia National Laboratories*, quien demostró que la solución del muy estudiado modelo de Ising no puede extenderse a tres dimensiones (3D). El modelo original desarrollado por Ernst Ising en 1925 como parte de su tesis doctoral, a menudo se usa para describir una variedad de fenómenos, desde el vuelo de los pájaros hasta el congelamiento de moléculas de agua. Ising solucionó el modelo en una dimensión; luego el premio novel Lars Onsager lo extendió a dos dimensiones. Los físicos matemáticos más prominentes han fallado en proveer una solución exacta para el modelo de Ising en tres dimensiones; sus propiedades pueden determinarse numéricamente con alta precisión, pero no exactamente, para cualquier red, y en términos de ecuaciones elementales. Istrail explicó el porque, usando un método llamado *intratabilidad computacional*, que identifica problemas que no pueden ser resueltos en un tiempo humanamente posible. Cerca de 6000 problemas de este tipo se conocen entre todas las áreas de la ciencia.

B. INTERACCIONES DE INTERCAMBIO

Las *interacciones de intercambio* no son más que interacciones electrostáticas, que aparecen porque las cargas eléctricas de mismo signo son costosas energéticamente cuando están juntas y ahorran energía cuando están separadas.

Un modelo simple con solo dos electrones puede describirse por el Hamiltoniano efectivo $H = -2J \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$, en el cual J representa la *constante de intercambio* (o integral de intercambio). El cálculo de la integral de intercambio puede ser complicado, pero existen algunas características generales. Si los dos electrones están en el mismo átomo, la constante de intercambio por lo general es positiva. Esto estabiliza el estado triplete y asegura un estado espacial antisimétrico que minimiza la energía de repulsión de Coulomb entre los dos electrones al mantenerlos separados. Cuando los dos electrones se encuentran en átomos vecinos, los electrones pueden ahorrar energía cinética formando uniones (bonds) que permiten que los electrones circulen entre los dos átomos. Los orbitales son ahora moleculares y no atómicos. Estos pueden ser *bonding* (espacialmente simétricos) o *antibonding* (espacialmente antisimétricos), siendo los orbitales antibonding más costosos energéticamente, debido a que tienen una mayor curvatura y por lo tanto una mayor energía cinética. Esto favorece los estados singletes, y que la integral de intercambio sea en la mayoría de los casos negativa.

Si los electrones de átomos magnéticos vecinos interactúan por medio de una interacción de intercambio, esto se conoce como *intercambio directo*, debido a que la interacción de intercambio procede directamente sin necesidad de un intermediario. Este caso raramente es así de simple en situaciones físicas reales. Por esta razón en muchos materiales magnéticos es

necesario considerar alguna clase de *interacción indirecta de intercambio*. Por ejemplo, MnO y MnF₂ son ambos antiferromagnéticos, a pesar de no existir una unión directa entre los electrones de los iones Mn²⁺ en ambos sistemas. La interacción de intercambio a menudo es de corto alcance, por lo que las interacciones de más largo alcance que operan en este caso se denominan de *superintercambio*. Puede definirse como una interacción indirecta de intercambio entre iones magnéticos no-vecinos los cuales son mediados por un ion no-magnético que se coloca entre los iones magnéticos. Aparece porque existe una prevalencia en la energía cinética por el antiferromagnetismo. En algunas circunstancias el superintercambio puede ser ferromagnético, pero es una interacción débil y menos común que el superintercambio antiferromagnético.

C. ALGUNOS TRABAJOS PREVIOS

Los siguientes páginas muestran algunos de los trabajos realizados dentro del grupo de Magnetismo y Materiales Avanzados de Manizales en los cuales he participado activamente. Algunos de estos trabajos han sido presentados en la modalidad de mural en congresos nacionales de física y en conferencias internacionales (International Conference On Magnetism ICM2003). En su mayoría están relacionados con el tema de las manganitas perovskitas desde el punto de vista experimental y teórico; y sin duda han construido los cimientos para la elaboración de esta tesis.

ESTUDIO EXPERIMENTAL DE $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ Y SIMULACION NUMERICA DE SISTEMAS MAGNETICOS TIPO ISING

Juan Reina^{(1)(a)}, Carlos Ramos^{(2)(b)} y Andrés Rosales^{(1)(c)}

GRUPO DE MAGNETISMO Y MATERIALES AVANZADOS
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA SEDE MANIZALES. A.A. 127



RESUMEN

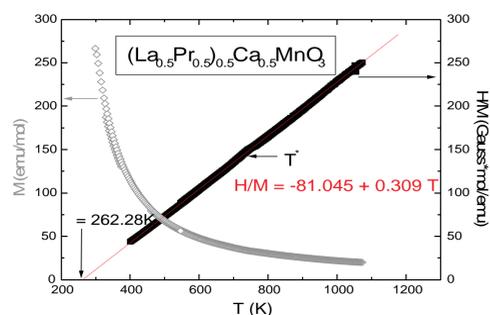
Se realizaron mediciones de magnetización en función de temperatura para compuestos de $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ con $0 < x < 1$, obtenidas a través de magnetometría por SQUID y de balanza de Faraday. La magnetización fue medida en distintos rangos de temperatura (4-300 K, y 300-1000 K) y para un campo (H) aplicado igual a 0.5 T. El compuesto $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ es una manganita de tierra rara que cristaliza en la estructura perovskita y presenta una rica variedad de fenómenos e interacciones magnéticas y eléctricas (magnetoresistencia colosal, orden de carga, antiferromagnetismo CE, ferromagnetismo débil, paramagnetismo). Se determinó la constante de Curie del Mn (C) y la temperatura de Curie-Weiss (θ) extrapolada de altas temperaturas; esta última indica que las interacciones ferromagnéticas dominan a alta temperatura. Sin embargo, debido a la competencia con otras interacciones antiferromagnéticas que se hacen evidentes por debajo de temperatura ambiente se observó que el material no desarrolla una fase ferromagnética completa. Para comprender algunos de los fenómenos presentes en las manganitas y en otros sistemas magnéticos, se simuló mediante el método de Monte Carlo aspectos cualitativos de sistemas ferromagnéticos y antiferromagnéticos para una red cuadrada bidimensional tipo Ising y un arreglo de cuatro subredes bidimensionales. Esta última configuración se introdujo para simular cualitativamente algunos ordenamientos magnéticos presentes en $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ y en otras manganitas, como por ejemplo el antiferromagnetismo tipo CE y el antiferromagnetismo tipo A. Los resultados reprodujeron aceptablemente el comportamiento magnético de $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ en la región de temperatura que presenta ordenamiento antiferromagnético tipo CE.

PLANTEAMIENTO

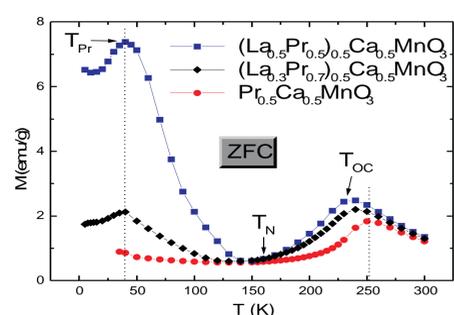
En los materiales $R_{1-x}A_xMnO_3$, con $0.2 < x < 0.5$ (R =tierra rara, La, Y, Pr, y A =Ca, Sr, Ba, Pb) el transporte eléctrico se ve favorecido si dos sitios vecinos, Mn^{3+} y Mn^{4+} , están polarizados ferromagnéticamente, originando una fuerte correlación entre la resistencia y la magnetización. Cerca de la temperatura de orden ferromagnético la resistencia depende del campo aplicado, dando origen a una magnetoresistencia que ha sido bautizada como magnetoresistencia colosal (CMR), debido a la magnitud del efecto. Este fenómeno nos motivó a estudiar las propiedades críticas y termodinámicas de manganitas compuestas por tierras raras, en especial de $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$, que también presenta el fenómeno CMR, además de mostrar interacciones complejas (doble intercambio y ordenamiento de carga) que son tema de investigación mundial en la actualidad. Este material es prometedor en aplicaciones de procesamiento magnético y almacenamiento de datos, además de ser muy interesante desde el punto de vista de la investigación básica, porque exhibe una rica variedad de fases e interacciones magnéticas. El compuesto $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$, que fue el objeto de estudio de la primera parte de este trabajo, no ha sido estudiado ni simulado completamente y así como otras manganitas, presenta fenómenos físicos complejos que aún se encuentran en etapa de investigación.

TECNICAS EXPERIMENTALES

Las mediciones de magnetización se realizaron por medio de un magnetómetro de SQUID MPMS2 para $4K < T < 300K$ y de la técnica de balanza de Faraday para $300K < T < 1200K$.



La magnetización $M(T)$ vs Temperatura (curva gris), el inverso de la susceptibilidad H/M (curva negra) y su ajuste lineal (curva roja) para $(La_{0.5}Pr_{0.5})_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ y $H = 0.5$ T.



Magnetización vs temperatura con $H = 0.5$ T para el compuesto $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ con $x = 1, 0.5$ y 0.3 obtenidas mediante ZFC

DISCUSIÓN

En T_{0C} 240-250K se presenta una coexistencia entre ferromagnetismo metálico y antiferromagnetismo aislante de tipo CE[3]. Se observó tanto en la curva de magnetización ZFC como en la curva de magnetización FC, que T_{0C} aumenta al aumentar x . Es posible que la transición de fase en T_{0C} se deba a una manifestación de orden de carga[1], que consiste en el estacionamiento de electrones debido al ordenamiento de cationes de diferentes cargas en lugares específicos de la red. Este fenómeno ha sido observado en otras manganitas[1] y es tema de investigación actualmente. Experimentalmente se ha encontrado que los compuestos $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ y $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ en presencia de un campo magnético alto muestran una transición de ordenamiento por carga-ferromagnético metálico inducida por campo; estos materiales desarrollan una fase ferromagnética pero el ordenamiento por carga no se destruye completamente. En esta transición de fase de antiferromagnético a ferromagnético se ha observado[3] una disminución drástica en la resistividad de más de diez órdenes de magnitud en $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$. Se ha encontrado[4] que el compuesto $Pr_{0.4}Ca_{0.6}MnO_3$ se ordena antiferromagnéticamente tipo CE en la temperatura de Néel (T_N 170 K) este ordenamiento se manifiesta como un máximo relativo en su magnetización y en $Pr_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ este pico ya no es evidente, tal como se presentó en éstas mediciones de magnetización en $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$.

El $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ presenta un máximo alrededor T_{pr} 40 K el cual está asociado con el ordenamiento antiferromagnético volcado o ferromagnetismo débil [1]; de forma similar el $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ presenta un pico en la anterior temperatura como se observa en la figura. El valor de T_{pr} en donde se presenta el máximo no depende apreciablemente de la concentración para $x=1, 0.5, 0.3$.

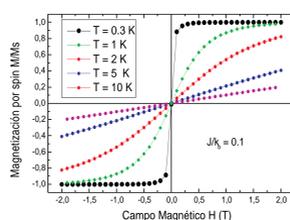
SIMULACION DE SISTEMAS MAGNETICOS TIPO ISING

El Modelo de Ising en Dos Dimensiones

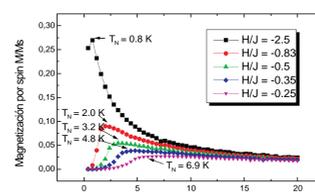
En el modelo de Ising [2] los espines pueden tener sólo dos estados: $+1$ (\uparrow) y -1 (\downarrow), en analogía con los sistemas electrónicos digitales cuyos estados pueden ser 0 o 1. Su energía está dada por la siguiente ecuación,

$$E = -J \sum_{i,j} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

En donde $s_i = \pm 1$, J es una medida de interacción entre espines, la primera sumatoria se hace sobre todos los pares de espines que son primeros vecinos y el segundo término corresponde a la energía de interacción entre el momento magnético con un campo magnético externo. N es el número de sitios de la red, o tamaño de la red.



Magnetización por espín en función de Campo Magnético Aplicado para un sistema ferromagnético tipo Ising con $J/k_b = 0.1$ en varias temperaturas.



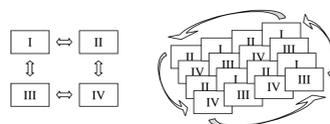
Magnetización media por espín vs Temperatura para un sistema antiferromagnético tipo Ising, variando J en la relación H/J .

Modelo de Red Rómbico de cuatro subredes

Con el propósito de simular en una primera aproximación uno de los ordenamientos magnéticos (AFM-CE) presentes en $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$, en este trabajo fue introducido este modelo compuesto por cuatro subredes rómbicas con condiciones periódicas de frontera, que está descrito por el siguiente hamiltoniano,

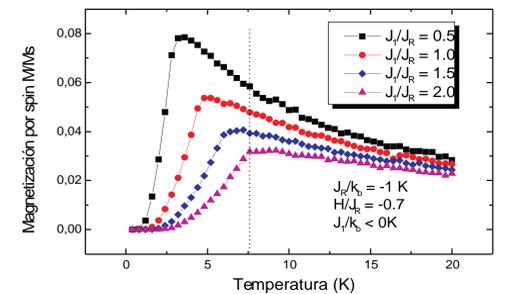
$$E = -J_1 \sum_{i,j} s_i s_j - J_R \sum_{i,j} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

En donde $s_i = \pm 1$, $nn(i)$ en la primera sumatoria representa los primeros vecinos en una subred, que interactúan entre sí mediante J_1 y en la segunda sumatoria representa los primeros vecinos entre subredes, los cuales interactúan por medio de J_R .



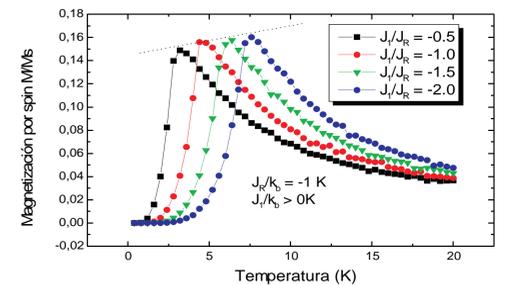
Interacción entre subredes en el modelo rómbico de cuatro subredes. Las flechas representan las condiciones periódicas de frontera entre subredes.

Antiferromagnetismo Tipo CE



Magnetización media por espín vs Temperatura para el modelo rómbico de cuatro subredes, variando J_1 en la relación J_1/J_R con $J_R/k_b = -1$ K, $H/J_R = -0.7$ y $J_1/k_b < 0$ K

Antiferromagnetismo Tipo A



Magnetización media por espín vs Temperatura para el modelo rómbico de cuatro subredes, variando J_1 en la relación J_1/J_R con $J_R/k_b = -1$ K, $H/J_R = -0.7$ y $J_1/k_b > 0$ K

CONCLUSIONES

Al aumentar la concentración de La ($1-x$) aumenta la temperatura de Curie-Weiss para el compuesto $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$. Esta dependencia indica que el Pr está ayudando a inhibir un ordenamiento ferromagnético que podría desarrollarse a temperaturas menores.

En este trabajo se han presentado algunas características del comportamiento magnético del compuesto $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$, pero es necesario realizar un estudio más extensivo para tener un mayor conocimiento de las diferentes fases y transiciones magnéticas que se presentan en este compuesto.

La dependencia de la temperatura T_{0C} con x encontrada experimentalmente para $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ tuvo un efecto similar al de modificar J_1 en J_1/J_R en el modelo de simulación de cuatro subredes para el AFM tipo CE. Al incrementar J_1 la temperatura en la que se presentó el máximo de magnetización aumentó con una correspondiente disminución en la magnetización, análogo al cambio que se presentó al aumentar x en $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$.

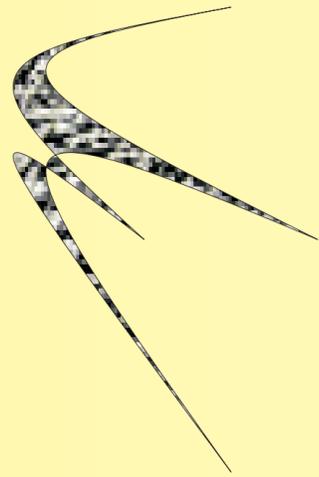
REFERENCIAS

- [1] Rao, C. N. R., *Change Ordering in Rare Earth Manganates: The Experimental Situation*. J. Phys.: Condens. Matter 12 (2000) R13-R106.
- [2] E. Ising, Z. Phys. Rev. Vol. 65 No. 253, 1925.
- [3] Smolyaninova, V.N, Biswas Amlan, *Anomalous field-dependent specific heat in charge-ordered $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ and $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$* . Physical Review B. Vol. 62, No. 10, 2001.
- [4] Lees, M. R, Barratt J., Balakrishnan G., Paul D. McK, Dewhurst C.D, *Low Temperature Magnetoresistance and Magnetic Ordering in $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$* . J. Phys: Condens. Matter Vol. 8, 1996, págs. 2967-2979.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo de investigación fue desarrollado gracias a la Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales y al Instituto Balseiro de S.C. de Bariloche, Argentina.

- (1) Laboratorio de Magnetismo y Materiales Avanzados de Manizales.
- (2) Instituto Balseiro, San Carlos de Bariloche, Argentina.



MAGNETIC BEHAVIOR OF $(\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x)_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$

Juan Reina^{1(a)}, Andrés Rosales^{1(b)}

¹LABORATORIO DE MAGNETISMO, UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA, SEDE MANIZALES. A.A. 127.

ABSTRACT

The rare earth manganites with perovskite structure $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ with $0 < x < 1$ are studied by magnetization measurements in a temperature interval $4 < T < 1000$ K for $H = 0.5$ T. Temperature dependence of the magnetization indicates the presence of ferromagnetic interactions at high temperatures; however, this compound does not develop a genuine ferromagnetic phase because of antiferromagnetic interactions become evident below room temperature where charge ordering takes place. It is found that the Curie-Weiss temperature increases with increasing of concentration of Lanthanum. This behavior suggests an inhibition of ferromagnetic ordering at low temperatures in $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ due to the presence of Praseodymium in this compound. We also suggest a four sublattice Ising antiferromagnet model for simulating CE-type antiferromagnetic ordering found in these compounds and colossal magnetoresistance (CMR). Simulations were performed by metropolis-Monte Carlo method based on the Kronig-Penney-Ising model for simulating CMR[3,4] and results were compared qualitatively with experimental data.

INTRODUCTION

In the compounds $R_{1-x}A_xMnO_3$, with $0.2 < x < 0.5$ ($R =$ rare earth, La, Y, Pr and $A =$ Ca, Sr, Ba, Pr) electrical transport becomes favored if two neighbour sites, Mn^{3+} and Mn^{4+} , are polarized ferromagnetically, giving place to a strong correlation between resistivity and magnetization. Near the ferromagnetic ordering temperature the resistivity depends of the applied field, originating a magnetoresistance that has been defined as colossal magnetoresistance (CMR), because of the magnitude of the effect. This phenomena has motivated us to study critical and thermodynamic properties of rare earth manganites, in particular, the compound $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ that presents CMR effect, and complex interactions (double exchange, charge ordering) that are the subject of world wide research nowadays. This compound is promising for magnetic processing applications and data storage, it is also very interesting from the basic research point of view because it exhibits a rich variety of phases and magnetic interactions. The compound $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ studied in this work has not been explained or modeled completely and like other manganites, presents complex physical phenomena that are not yet fully explained.

EXPERIMENTAL RESULTS

Magnetization measurements were obtained with a SQUID MPMS2 magnetometer for $4 < T < 300$ K and for $300 < T < 1200$ K with the Faraday's balance technique.

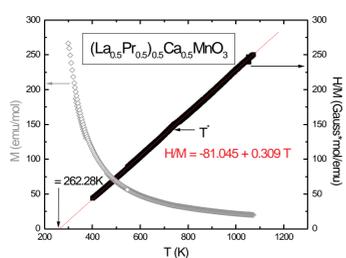


Fig. 1. Magnetization DC and susceptibility DC versus temperature for $(La_{0.5}Pr_{0.5})_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$

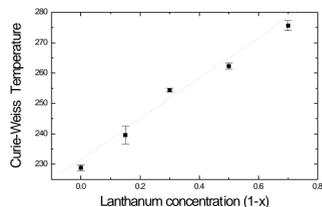


Fig. 2. Curie-Weiss temperature versus Lanthanum concentration $(1-x)$.

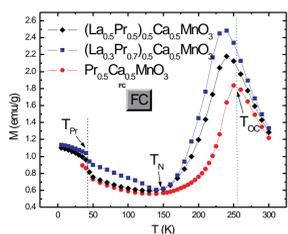


Fig. 3. Magnetization versus temperature with $H = 0.5$ T obtained through zero field cooling technique (ZFC).

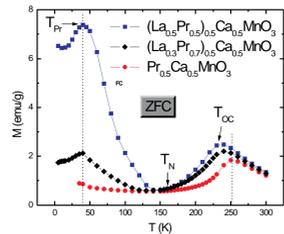


Fig. 4. Magnetization versus temperature with $H = 0.5$ T obtained through field cooling technique (FC).

DISCUSSION

At $T_{OC} \approx 240-250$ K the compound $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ presents a coexistence between ferromagnetic metallic and CE-type antiferromagnetic insulator[6]. It was observed in both the ZFC and FC magnetization curves, that T_{OC} increases at increasing x . It is possible that the phase transition at T_{OC} is due to charge ordering, which consists in the localization of electrons due to the ordering of cations of differing charges on specific lattice sites[4]. This phenomena has been observed in other manganites[4] and is subject of research nowadays. Experimentally, it has been found that the compounds $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ and $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ in the presence of a high magnetic field, show a charge ordered-metallic ferromagnetic transition induced by field; these compounds develop a ferromagnetic phase but charge ordering is not destroyed completely. In this transition from antiferromagnetic to ferromagnetic has been observed a drastic decrease in resistivity of ten orders of magnitude in $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$. It has been found[1] that the compound $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ orders antiferromagnetically CE-type at Néel's temperature ($T_N \approx 170$ K). This ordering manifests as a peak in its magnetization, in $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ this feature is no longer evident, just like our magnetization measurements in $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$.

The compound $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ presents a maximum at $T_{PR} \approx 40$ K which is related to canted antiferromagnetism or weak ferromagnetism orderings[4]; in a similar way, $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ shows a peak at this temperature like it is observed in the Fig. 4. The value of T_{PR} does not depend of concentration for $x=1,0.5,0.3$.

A FOUR SUBLATTICE ISING ANTIFERROMAGNET MODEL

At low temperatures rare earth manganites are antiferromagnetically ordered (AFM) with CE- or A-type ordering. As an attempt to simulate these magnetic orderings we have created a structure of four Ising lattices that interact antiferromagnetically between each other through J_R in the following hamiltonian,

$$E = \sum_{i,j} J_1 s_i s_j + \sum_{i,j} J_R s_i s_j + H \sum_i s_i$$

where $s_i = \pm 1$, and $nn(i)$ on the first sum represents nearest neighbours in a sublattice, but on the second sum represents nearest neighbours between sublattices. H is the magnetic field. By choosing the periodic boundary conditions shown in Fig. 5, the effects of the lattice size are reduced.

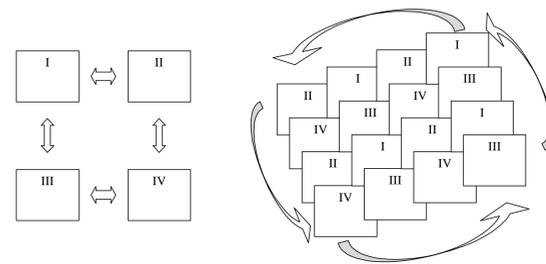


Fig.5 Interactions between sublattices and boundary conditions.

CE-TYPE AFM ORDERING

CE-type ordering occurs in the charge-ordered materials where the e_g electrons are localized[4]. Since this antiferromagnetic state is attained on cooling a charge-ordered paramagnetic state, we have compared our results to experimental data on $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$. In our model J_1 is negative for CE-type AFM ordering. Magnetization curves were obtained and qualitatively matched the magnetic behavior of $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ at a temperature T in the range $[T_N, T_{OC}]$. The effect of increasing the ratio J_1/J_R is similar to increasing x in $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ as it is described in Figs. 6 and 7.

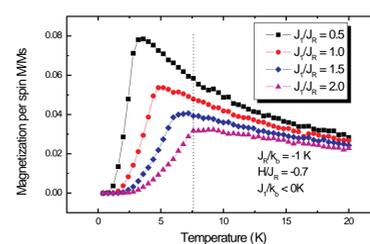


Fig. 6. CE-type Model magnetization as a function of temperature for various ratios of J_1/J_R at fixed field.

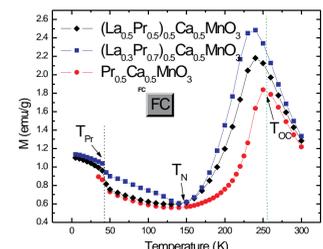


Fig. 7. Experimental magnetization as a function of temperature for the compound $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ at a fixed field of 0.5T.

Model resistivity versus temperature showed a few of the transport features of $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$. Increasing field results in the formation of a peak in resistivity with decreasing magnitude, as Fig. 8 and Fig. 9 clearly show.

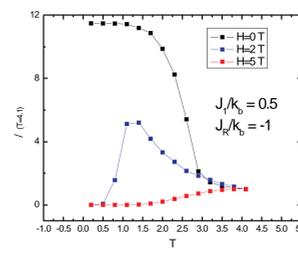


Fig. 8. A-type model resistivity versus temperature for various values of field.

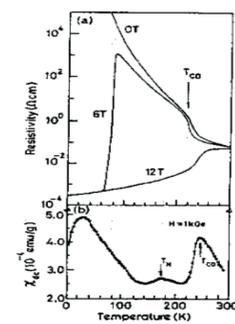


Fig. 9. Experimental resistivity versus temperature for various values of field for the compound $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ from [4].

CONCLUSION

Increasing Lanthanum concentration $(1-x)$ increases the Curie-Weiss temperature θ for $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$. This dependency indicates that Praseodymium is helping the inhibition of a ferromagnetic ordering that could develop at low temperatures.

We have presented a few features of the magnetic behavior of $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$, but it is necessary to continue with a more detailed work to acquire a better understanding of the different phases and magnetic transitions that are present in this compound.

The temperature dependence of T_{OC} with x found experimentally for $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ had a similar effect of modifying J_1/J_R in our four sublattice antiferromagnet model for CE-type antiferromagnetism.

REFERENCES

- [1] M. R. Lees et al. J. Phys. Low temperature magnetoresistance and magnetic ordering in $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$. Condens. Matter 8 (1996) 2967-2979
- [2] Lillis R. Ising Model Simulation of the Conductive Properties of Mixed Valence Manganites. (2001)
- [3] N. Vandewalle, M. Ausloos, and R. Cloots. The Kronig-Penney-Ising picture of the colossal magnetoresistance. (2003)
- [4] C.N.R. Rao, Anthony Arulraj, A. K. Cheetham and Bernard Raveau. Charge Ordering in the Rare Earth Manganates: The Experimental Situation. (1999)
- [5] Hotta, T., Dagotto E. Theory of Manganites. (2002)
- [6] Smolyaninova, V.N, Biswas Amlan, Anomalous field-dependent specific heat in charge-ordered $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ and $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$. Physical Review B. Vol. 62, No. 10. (2001)

ACKNOWLEDGMENTS

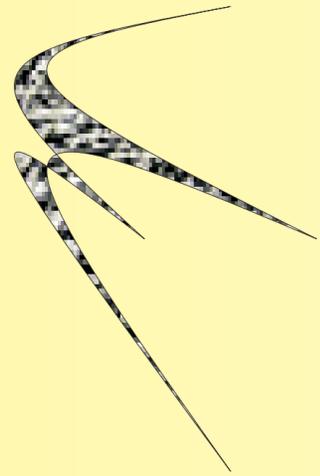
Thanks to Universidad Nacional de Colombia branch Manizales for partially financing this project and for making possible our participation to ICM2003.

Thanks to Carlos Ramos (Instituto Balseiro, S.C de Bariloche, Argentina) for introducing us to the interesting subject of manganites and for his special contribution to the growth of our young group.

Thanks to Fran Rivadulla (Texas Materials Institute, Texas, U.S.A) for preparing the samples that we measured in this work.

- 1(a) arosales@epm.net.co
- 1(b) juanreina@hotmail.com





A FOUR-SUBLATTICE ISING ANTIFERROMAGNET MODEL: APPLICATION TO THE $(\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x)_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$

Andrés Rosales^{1(a)} Juan Reina^{1(b)},

¹LABORATORIO DE MAGNETISMO, UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA, SEDE MANIZALES. A.A. 127.

ABSTRACT

A model for an Ising antiferromagnet with a four-sublattice structure is studied by using Monte Carlo–Metropolis algorithm. The magnetization curves are obtained, and the results are applied to magnetic orderings found in rare earth manganites with perovskite structure $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$, such as CE- and A-type antiferromagnetic orderings. The results are in good qualitative agreement with various available experimental magnetic features for $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$, in particular with the observation of CE-type antiferromagnetic ordering at low temperatures[1]. Resistivity behavior for this model was also studied based on the Kronig-Penney-Ising model[3] for colossal magnetoresistance (CMR). Resistivity results reproduced in some cases the electrical behavior of rare earth manganites.

INTRODUCTION

Manganites are very interesting compounds, their potential application to technological devices and their complex physical phenomena has captured the interest of many scientists and engineers. Many theories have been proposed for explaining their complex spin-charge-orbital orderings and their most useful effect, CMR. One of the early considerations was proposed by Zener in 1951, namely the double exchange mechanism, but the formation of coexisting clusters of competing interactions is the dominant theory at present[5]. Despite the existing theories for CMR, the exact temperature and field behaviors are not yet fully understood. In an attempt to contribute to the scene, we have created a very simple model based on the two dimensional Ising model to reproduce the CE- and A-type antiferromagnetic orderings found in rare earth manganites at low temperature. Magnetization curves were obtained by the Metropolis-Monte Carlo simulation method and resistivity curves by the simple but powerful Kronig-Penney-Ising model[3]. Our results are compared qualitatively to previously available experimental data.

A FOUR SUBLATTICE ISING ANTIFERROMAGNET MODEL

At low temperatures rare earth manganites are antiferromagnetically ordered (AFM) with CE- or A-type ordering (Fig. 1). As an attempt to simulate these magnetic orderings we have created a structure of four Ising lattices that interact antiferromagnetically between each other through J_R in the following hamiltonian,

$$E = \sum_{i,j} J_1 s_i s_j + \sum_{i,j} J_R s_i s_j + \sum_i H s_i$$

Fig. 1. A- and CE- type antiferromagnetic ordering in rare earth manganites

where $s_i = \pm 1$, and $nm(i)$ on the first sum represents nearest neighbours in a sublattice, but on the second sum represents nearest neighbours between sublattices. H is the magnetic field. By choosing the periodic boundary conditions shown in Fig. 2, the effects of the lattice size are reduced.

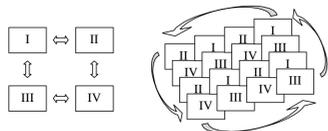


Fig.2 Interactions between sublattices and boundary conditions.

RESULTS AND ANALYSIS

Interaction between sublattices is antiferromagnetic for both CE- and A-type orderings, therefore, J_R must be negative. We choose J_1 negative for CE-type and positive for A-type. Before showing the results for CE- and A-type orderings we present a few results for a classical Ising model and compare the results to experimental data for a mixed valence manganite, i.e. $La_{1-x}Ca_xMnO_3$.

SIMULATING CMR FOR MIXED VALENCE MANGANITES

Many different approaches have been tried to model CMR such as the magnetic polaron ideas. Our work is mostly based on the Kronig-Penney-Ising model and the simulations performed by R. Lillis[2] for mixed valence manganites.

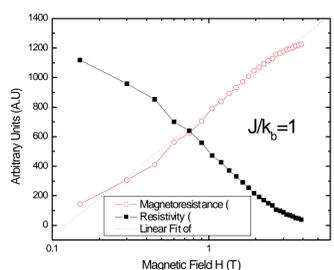


Fig. 3. Classic Ising model semilog plot of Resistivity (\bar{n}) and $\bar{A}\bar{n}$ versus applied field H.

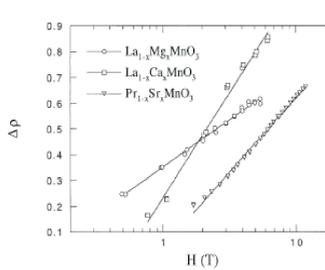


Fig. 4. Experimental semi-log plot of the evolution of the magnetoresistance $\bar{A}\bar{n}$ as a function of the magnetic field for various compounds from ref. [3]

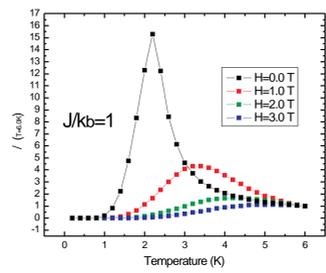


Fig. 5. Classic Ising model of $\bar{n}/\bar{n}(T=6.0K)$ versus temperature for various values of field H

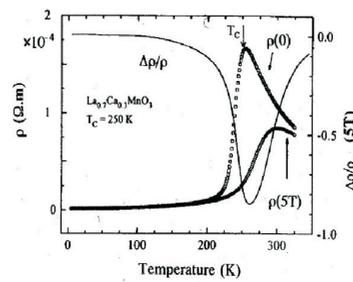


Fig. 6. Experimental resistivity and magnetoresistance of a mixed-valence manganite showing a metal-insulator transition from [2].

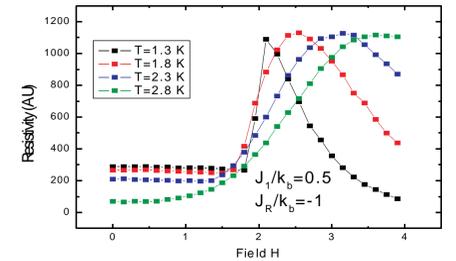


Fig. 13. A-type model resistivity versus applied field at various temperatures

CE-TYPE AFM ORDERING

CE-type ordering occurs in the charge-ordered materials where the e_g electrons are localized[4]. Since this antiferromagnetic state is attained on cooling a charge-ordered paramagnetic state, we have compared our results to experimental data on $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$. In our model J_1 is negative for CE-type AFM ordering. Magnetization curves were obtained and qualitatively matched the magnetic behavior of $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ at a temperature T in the range $[T_N, T_{OC}]$. The effect of increasing the ratio J_1/J_R is similar to increasing x in $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ as it is described in Figs. 7 and 8.

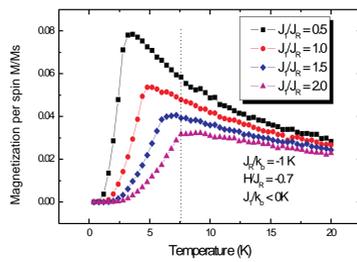


Fig. 7. CE-type Model magnetization as a function of temperature for various ratios of J_1/J_R at fixed field.

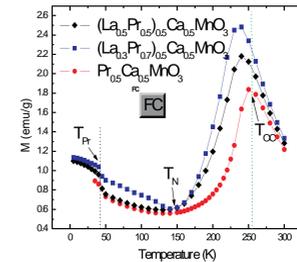


Fig. 8. Experimental magnetization as a function of temperature for the compound $(La_{1-x}Pr_x)_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ at a fixed field of 0.5T.

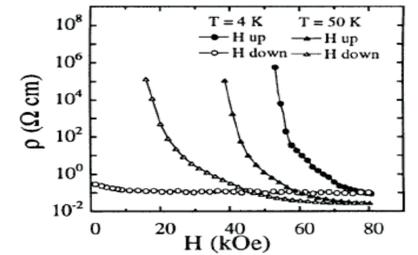


Fig. 14. Experimental resistivity versus magnetic field for $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ from [1].

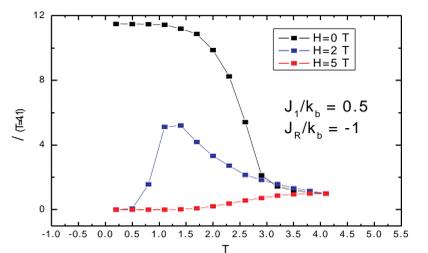


Fig. 15. A-type model resistivity versus temperature for various values of field.

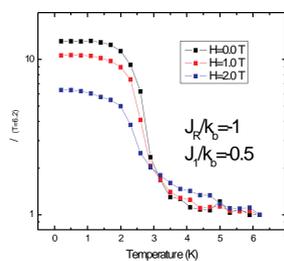


Fig. 9. CE-type model $\bar{n}/\bar{n}(T=6.0K)$ as a function of temperature at various values of field.

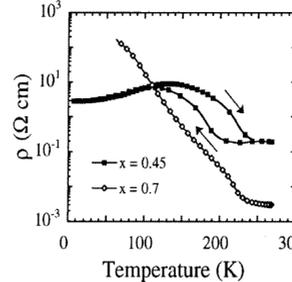


Fig. 10. Experimental resistivity versus temperature for $Pr_{0.55}Ca_{0.45}MnO_3$ and $Pr_{0.3}Ca_{0.7}MnO_3$ [1].

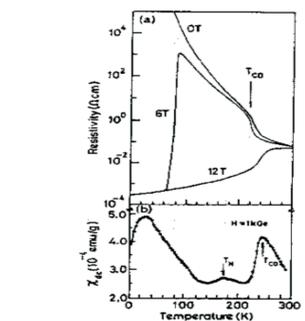


Fig. 16. Experimental resistivity versus temperature for various values of field for the compound $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ from [4].

A-TYPE AFM ORDERING

In our model J_1 is positive for A-type AFM ordering. According to ref [4], on cooling, the compound $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ orders CE-type containing ferromagnetically aligned chains along the c axis. A-type AFM ordering is somewhat similar because it also exhibits a competition between ferromagnetism and antiferromagnetism. Our simulation results for A-type AFM ordering were in most cases similar to the magnetic and electric behavior of $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$. Fig. 11 indicate the magnetization behavior characteristic of a metamagnetic (AFM-ferromagnetic) transition induced by magnetic field. A very similar behavior is found on $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$, as pictured by Fig. 12.

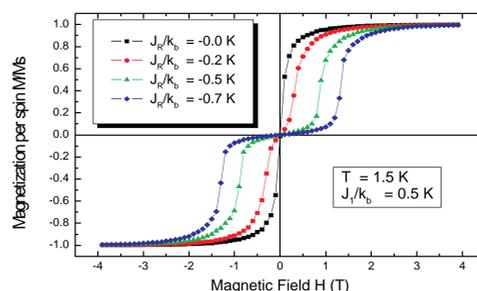


Fig. 11. A-type model magnetization as a function of field at various values of the sublattice interaction constant J_R .

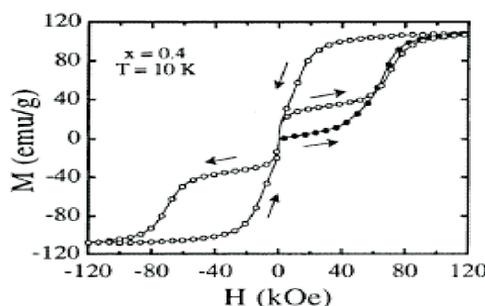


Fig. 12. Experimental magnetization versus applied field loops for $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ from [1].

CONCLUSION

We have tried to keep the *four sublattice Ising antiferromagnet* model as simple as possible and yet it exhibits some complex behavior, probably not as close as one might like for simulating electrical and magnetical behavior for manganites but it still reproduces qualitatively a few of these features without the use of any recent formal theories of manganites such as the magnetic polaron idea for simulating CMR.

Our A-type AFM model did not reproduce the resistivity of $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ as a function of applied field. CE-type model with J_R positive must be tested in order to obtain better agreement with experimental data. Despite that difference, other magnetic and transport behavior of $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ was reproduced reasonably well by the A-type model.

REFERENCES

- [1] M. R. Lees et al. J. Phys. Low temperature magnetoresistance and magnetic ordering in $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$. Condens. Matter 8 (1996) 2967-2979
- [2] Lillis R. Ising Model Simulation of the Conductive Properties of Mixed Valence Manganites. (2001)
- [3] N. Vandewalle, M. Ausloos, and R. Cloots. The Kronig-Penney-Ising picture of the colossal magnetoresistance. (2003)
- [4] C.N.R. Rao, Anthony Arulraj, A. K. Cheetham and Bernard Raveau. Charge Ordering in the Rare Earth Manganates: The Experimental Situation. (1999)
- [5] Hotta, T., Dagotto E. Theory of Manganites. (2002)

ACKNOWLEDGMENTS

Thanks to Universidad Nacional de Colombia branch Manizales for partially financing this project and for making possible our participation to ICM2003.

Thanks to Carlos Ramos (Instituto Balseiro, S.C de Bariloche, Argentina) for introducing us to the interesting subject of manganites and for his special contribution to the growth of our young group.

EL MODELO DE POTTS NO HOMOGENEO. LA BASE DEL AGRUPAMIENTO SUPERPARAMAGNETICO DE DATOS

Deyris López^{(1)(a)}, Juan Reina^{(1)(b)}, Andrés Rosales^{(1)(c)} y Lina Sanchez⁽¹⁾

GRUPO DE MAGNETISMO Y MATERIALES AVANZADOS
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA SEDE MANIZALES. A.A. 12



RESUMEN

En el presente trabajo se simuló el modelo de Potts homogéneo y no homogéneo usando el método numérico de Monte Carlo con el objetivo de implementar el método de agrupamiento superparamagnético de datos desarrollado por Eytan Domany et al.[1]. Se probaron varias distribuciones de la constante de interacción (J) entre espines y varios números de estados (q) para una red cuadrada y con condiciones periódicas de frontera. Se obtuvieron resultados de magnetización y susceptibilidad DC contra temperatura y configuraciones de espines que dependen fuertemente de la distribución de J en la red, y del valor de q .

PLANTEAMIENTO

El algoritmo de agrupamiento superparamagnético de datos desarrollado por Eytan Domany et al.[1] se basa en el modelo de Potts no homogéneo y es ampliamente utilizado en una gran variedad de disciplinas científicas y aplicaciones en ingeniería como reconocimiento de patrones, teoría del aprendizaje, astrofísica, procesamiento de datos, compresión y restauración de imágenes, análisis de datos de satélite y muchos otros. Como fase previa para implementar este algoritmo se simuló el modelo de Potts homogéneo y no homogéneo mediante el método numérico de Monte Carlo [3].

EL MODELO DE POTTS EN DOS DIMENSIONES

En este modelo las variables de espín s pueden tomar uno de q valores enteros: $s = 1, 2, \dots, q$. Cada espín Potts está localizado en un punto v_i que reside sobre un sitio de una red, además cada par de espines asociados con los puntos i y j están acoplados por una interacción de fuerza J_{ij} . La energía de una configuración de N espines $S = \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j$ es dada por el Hamiltoniano:

$$\zeta S = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} 1_{s_i, s_j} \quad s_i = 1, 2, \dots, q,$$

Donde la notación $\langle i, j \rangle$ es dada para sitios v_i y v_j vecinos. La función $1_{s_i, s_j}$ es igual a 1 si $s_i = s_j$ y cero en otro caso. N es el número de sitios de la red o tamaño de la red.

La magnetización $M(S)$ asociada con la configuración de espines S es definida [2] como:

$$M(S) = \frac{q N_{\max} s - N}{q - 1 N}$$

Con

$$N_{\max} s = \max \{N_1 s, N_2 s, \dots, N_q s\}$$

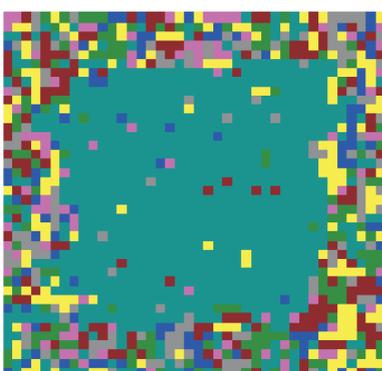
Donde N_s es el número de espines con el valor s :

$$N_s = \sum_i 1_{s_i, s}$$

La variación de la magnetización está relacionada de la siguiente forma con una cantidad térmica relevante, la susceptibilidad magnética,

$$\frac{1}{T} \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$$

la cual también refleja las fases termodinámicas del sistema.



Configuración de espines, para $T = 0.31K$ y $q = 7$, con distribución Gaussiana de la constante de interacción J . Cada color indica un estado.

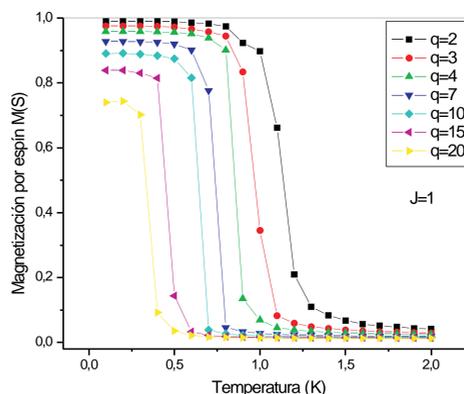
DISCUSIÓN

Todos los resultados presentados en este trabajo fueron obtenidos para una red cuadrada con 40^2 sitios en dos dimensiones a campo cero. En las curvas de magnetización obtenidas para el modelo de Potts homogéneo se observó que para J mayor que cero el sistema exhibe una transición de fase de orden a desorden, a bajas temperaturas la fase es ferromagnética y a altas temperaturas es paramagnética. Se ha observado en las curvas de susceptibilidad que aumentando el número de estados q , la transición de fase ferromagnética a paramagnética se desplaza a temperaturas menores y además la magnitud de la susceptibilidad \div aumenta en la temperatura de transición. Por otro lado incrementando la constante de interacción J , la transición se desplaza hacia temperaturas superiores y la magnitud de la susceptibilidad en la temperatura de transición disminuye o sea que el ferromagnetismo se ve favorecido al aumentar el valor de J .

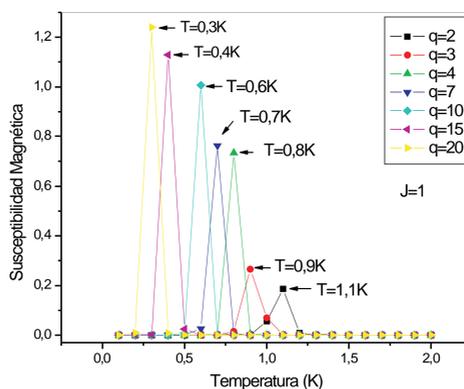
Disponiendo J sobre la red en forma de distribución Gaussiana se observó que el sistema también se comporta ferromagnéticamente a temperaturas bajas y paramagnéticamente a altas, sin embargo en temperaturas intermedias entre estas dos fases se presentaron grupos de espines alineados en la misma dirección, los cuales dependen fuertemente de la distribución de J , apareciendo la fase superparamagnética. Esta es precisamente la base del agrupamiento superparamagnético de datos, en el cual se halla una distribución de J_{ij} basado en las distancias (diferencias) entre objetos a ser agrupados.

RESULTADOS SIMULACION

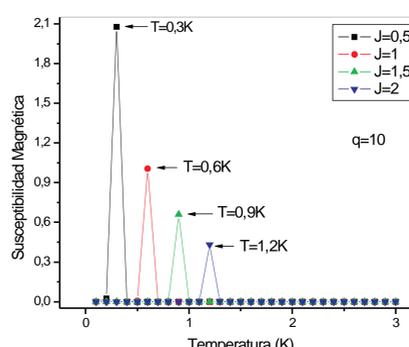
Modelo de Potts homogéneo



Magnetización vs Temperatura, para $J = 1$ variando el número de estados q .

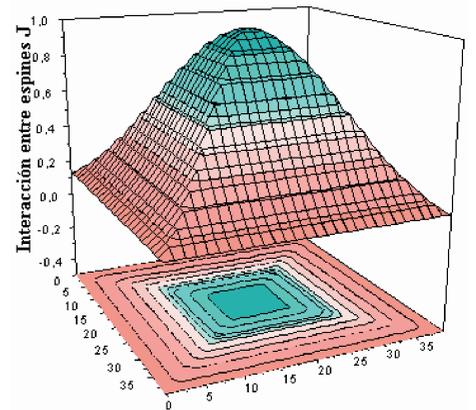


Susceptibilidad magnética vs Temperatura, para $J = 1$ variando el número de estados q .

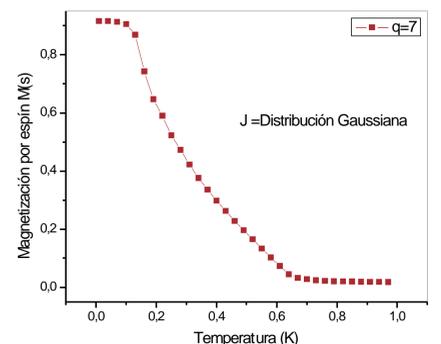


Susceptibilidad magnética vs Temperatura, para $q = 10$ variando la constante de interacción J .

Modelo de Potts no homogéneo



Disposición de la constante de interacción J sobre la red en forma de distribución Gaussiana.



Magnetización vs Temperatura, para $q = 7$ con distribución Gaussiana de la constante de interacción J .

CONCLUSIONES

El modelo de Potts depende en gran medida de la distribución de J en la red y también del número de estados q . El efecto de aumentar q es desplazar la transición a temperaturas menores además de aumentar la magnitud de \div en la temperatura de transición. Por otro lado, al incrementar J la transición se desplaza hacia temperaturas superiores y la magnitud de \div en la temperatura de transición disminuye.

Posteriormente se implementará el algoritmo de agrupamiento superparamagnético de datos basándose en la dependencia ilustrada en este trabajo de la distribución de la constante de interacción y del número de estados en el comportamiento del modelo de Potts no homogéneo.

REFERENCIAS

- [1] Shai Wiseman, Marcelo Blatt and Eytan Domany, Department of Physics of Complex Systems, The Weizmann Institute of Science, **Super-paramagnetic clustering of data**, Rehovot 76100, Israel (Submitted to PRE, November 3, 1997).
- [2] Chen, S., Ferrenberg, A.M., y Landau D.P. 1992, **Randomness induced second order transition in the two dimensional eight state Potts model: a Monte Carlo study**, Physical Review Letters, 69 (8), 1213-1215.
- [3] Harvey Gould and Jan Tobochnik, **An Introduction to Computer Simulation Applications to Physical Systems**, Second Edition, 1996.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo de investigación fue desarrollado gracias a la Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales.

(1) Laboratorio de Magnetismo y Materiales Avanzados de Manizales.

- (a) deyrisl@yahoo.com
- (b) juanreina@hotmail.com
- (c) arosales@epm.net.co