

SUSCEPTIBILIDAD MAGNETICA EN $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$

R. López Planes y Z. Pérez

Departamento de Física, Universidad de Oriente, Cumaná, 6101, Venezuela A.P. 245

ralopez@sucre.udo.edu.ve

Resumen

Presentamos un estudio teórico para determinar la susceptibilidad magnética en las aleaciones $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$ con x comprendido entre 0 y 1. Se hallan los parámetros de red y las constantes de intercambio magnético para calcular la magnetización y la susceptibilidad magnética. El cálculo se realiza usando Teoría Funcional de la Densidad y el Método de Monte Carlo.

Descriptores: DFT, Monte Carlo, Magnetización

Summary

A theoretical study is presented for to determine of magnetic susceptibility in $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$ alloys, with x between 0 and 1. The calculations were performed using Density Functional Theory and Monte Carlo Method for determine lattice parameters, exchange constants, the magnetization and susceptibility.

INTRODUCCION

Los óxidos con metales de transición 3d son materiales de gran importancia en estudios de nuevos materiales, brindando una buena fuente de información sobre comportamientos novedosos en las propiedades físicas, tales como superconductividad en cupratos (Reyes y Shaw, 1989) y magnetorresistencia colosal (Ramírez, 1997). El desarrollo de nuevos materiales ha implicado el conocimiento de muchas propiedades magnéticas de interés

particular, entre estos nuevos materiales están los perovskitas, siendo $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$ uno de los que ofrece mayor interés por su amplio espectro de propiedades magnéticas. En este trabajo aplicamos un modelo para, a través de la Teoría Funcional de la Densidad (DFT) y el Método de Monte Carlo (MC), calcular la susceptibilidad magnética de esta aleación en un rango de x que va desde 0 hasta 1.

METODOLOGIA

Las aleaciones $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$ son sistemas que cristalizan en una estructura perovskite con ciertas distorsiones debido al tamaño que presentan tanto el Te^{+4} como el Se^{+4} , al incrementar el valor de x las distorsiones pueden afectar el comportamiento magnético del material, generando un carácter anisotrópico en el mismo, a pesar de ello, Iñiguez y Yildirim (2004) sugieren que las distorsiones son de tal magnitud que para cálculos teóricos pueden considerarse mínimas. A través de DFT se determinó el comportamiento de los parámetros de red, en función de la cantidad de Te y Se. La Tabla I muestra los valores obtenidos para los parámetros de red, en función de las concentraciones de Se y Te.

El modelo asume un sistema clásico de N átomos distribuidos en una red cúbica $N_x \times N_y \times N_z$, con el espín S_i tomando solo valores $\pm 1/2$ de acuerdo a la orientación, los espines se asumen interactuando con sus vecinos mas cercanos con una constante de intercambio $-J$, que depende de los valores reportados en la Tabla I ya que la constante de intercambio depende de la posición del material, en la Tabla II se dan los valores de J para SeCuO_3 y TeCuO_3 respectivamente, expresadas en meV, donde los subíndices 1, 2 y 3 corresponden a los ejes a , b y c de los parámetros de red.

Describimos las interacciones magnéticas por un hamiltoniano tipo Heisenberg en el cual se incluyen las constantes de intercambio dadas en la tabla II. Los espines pueden interactuar también con un campo magnético aplicado B , con energía $-\mu S_i B$, donde μ es el momento magnético asociado con cada espín.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \mu \sum_i B S_i \quad (1)$$

Computamos los valores de J requeridos para que el hamiltoniano determine, a un nivel clásico, las diferencias de energía entre las configuraciones de los espines, a través del método de Monte Carlo. Para una concentración dada distribuimos aleatoriamente las N partículas en una red definida en el grupo espacial $Pnma$ (ortorrómbica) con condiciones de contorno periódicas. En cada interacción de Monte Carlo se escoge un espín al azar y se calcula su campo local generado por los otros $N-1$ espines; luego, una nueva dirección de los espines es considerada para luego calcular el cambio de energía. La transición para una nueva dirección se realiza con la máxima probabilidad, si no hay transición permitida, se realiza un cambio en la dirección del espín y se repite el proceso. Para cada concentración calculamos a diferentes temperaturas, las fluctuaciones de la magnetización M .

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_i M_i e^{-\beta H}}{\sum_i e^{-\beta H}} \quad (2)$$

Para inicializar el cálculo a una temperatura dada se crea una configuración donde todos los espines están alineados en una misma dirección. Para asegurar el equilibrio se hacen 500 pasos de Monte Carlo por espín para cada temperatura antes de calcular los promedios. Cada dos pasos de Monte Carlo se toman los valores instantáneos de la componente z de la

magnetización, el proceso se repite 5000 veces para calcular los promedios, una vez determinados los promedios se obtiene la susceptibilidad magnética, a través de la expresión:

$$\chi = \frac{\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle}{NKT}, \quad (3)$$

donde N es el número de espines. Las temperaturas críticas se obtienen del máximo de la susceptibilidad. Para realizar los cálculos a una nueva temperatura, se toma la configuración final de la temperatura anterior como la nueva configuración.

Discusión de resultados

Hemos calculado la susceptibilidad magnética para cada concentración, las figuras 1, 2 y 3 muestran el comportamiento del inverso de la susceptibilidad con respecto a la temperatura, tomando en consideración los valores de J .

Para $x=0$, observamos que hay transición al ferromagnetismo cuando no consideramos campos magnéticos externos, en contraste, para $x=1,0$ el comportamiento es consistente con una transición antiferromagnética como lo sugieren Submaniam *et al* (1999) en sus reportes experimentales, igualmente se puede observar que hay diferencias de los valores obtenidos al considerar los valores de J , evidenciando que la anisotropía es pequeña, ya que la variación del comportamiento de la susceptibilidad magnética es pequeña.

Conclusiones

El modelo que hemos presentado es ab initio, de interacción entre primeros vecinos. Estas aleaciones corresponden a un sistema de interacción localizado, este grado de localización debe tomarse en cuenta para el cálculo apropiado. La susceptibilidad magnética es descrita

satisfactoriamente por el modelo en el rango de concentraciones estudiadas, se evidencia que este sistema presenta para valores de x menores de 0,5 transiciones ferromagnéticas, al acercarnos a 0,5 hay una tendencia hacia las transiciones ferromagnéticas comparable con lo reportado en la literatura. El éxito del modelo se apoya en la idea de que la magnetización es producida por la interacción de los primeros vecinos para un momento localizado. La descripción apropiada de las propiedades magnéticas estudiadas, al ser comparadas con los valores experimentales, hacen válido el modelo y brinda una manera de calcular propiedades magnéticas en un buen rango de concentraciones.

Agradecimiento

Los autores agradecen al Consejo de Investigación de la Universidad de Oriente por su apoyo financiero.

Referencias

Beyers R. and Shaw T. (1989) *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull (Academic Press, New York), Vol. 42, pp. 91 – 212.

Iñiguez J. and Yildirim T. (2005) Unusual structural tuning of magnetism in cuprate perovskites. *Phys. Rev. B* **71**, 180415 – 180419.

Ramírez A. (1997) Colossal magnetoresistance. *J. Phys. Condens. Matter* **9**, 8171 – 8199.

Subramanian M.; Ramírez A. and Marshall W. (1999) Structural tuning of ferromagnetism in a 3D cuprate perovskite. *Phys. Rev. Lett.* **82**(7), 1558 – 1560.

Tabla I. Parámetro de red de $\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x\text{CuO}_3$ calculado con DFT.

Tabla II. Valores de la constante de intercambio, considerando la anisotropía del sistema, expresadas en meV.

Figura 1 Susceptibilidad magnética calculada respecto a la temperatura, para $x=0,0$ para J_1 , J_2 y J_3 .

Figura 2 Susceptibilidad magnética calculada respecto a la temperatura, para $x=0,5$ para J_1 , J_2 y J_3 .

Figura 3 Susceptibilidad magnética calculada respecto a la temperatura, para $x=1,0$ para J_1 , J_2 y J_3 .

Tabla I

x	a (Å)	b (Å)	c (Å)
0.0	5.972	7.330	5.290
0.2	5.972	7.318	5.360
0.4	5.972	7.310	5.440
0.5	5.974	7.300	5.472
0.6	5.976	7.285	5.540
0.8	5.978	7.275	5.603
1.0	5.980	7.265	5.645

Tabla II

x	J ₁	J ₂	J ₃
0.0	-4.4	-1.3	-0.8
1.0	6.3	-1.5	-0.5

Figura 1

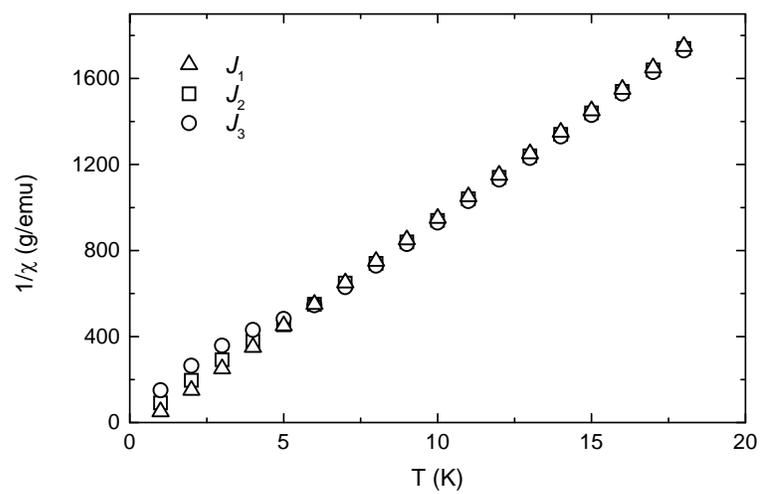


Figura 2

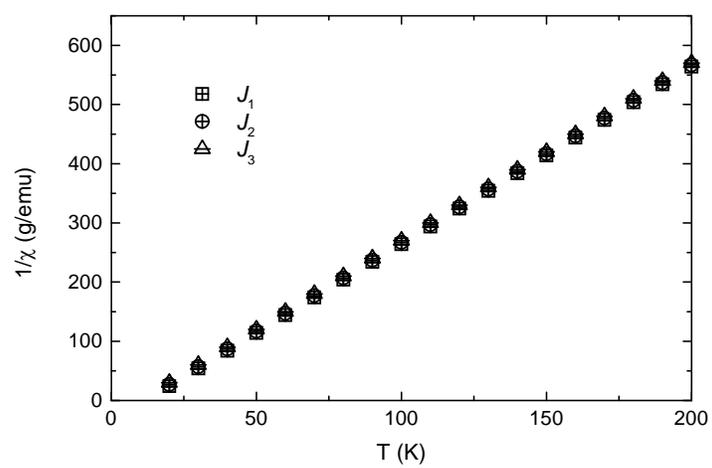
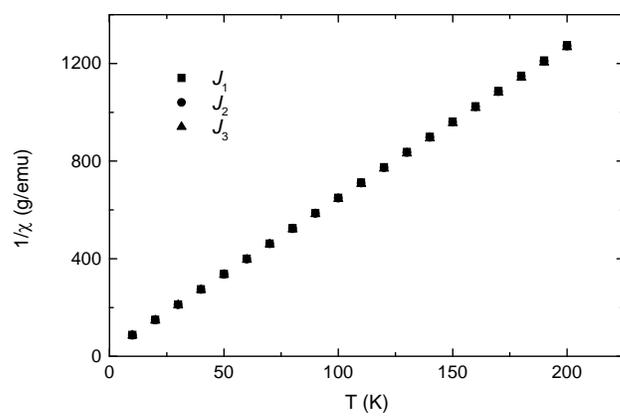


Figura 3



Resumen Curricular

Ramón López Planes

Doctor en Ciencias

Mg Sc. en Física

Lic. en Física

Profesor Investigador

Universidad de Oriente

Departamento de Física, Escuela de Ciencias, Cumaná, 6101, Venezuela A.P. 245

ralopez@sucre.udo.edu.ve

Zabdi Pérez

Estudiante Tesista

Licenciatura en Física

Universidad de Oriente

Departamento de Física, Escuela de Ciencias, Cumaná, 6101, Venezuela A.P. 245