



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

COMPORTAMIENTO DE LA MAGNETIZACIÓN EN LA ALEACION AITi  
(Modalidad: Investigación)

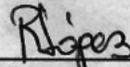
JOSÉ ANTONIO ZABALA LISETT

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

CUMANÁ, 2010

COMPORTAMIENTO DE LA MAGNETIZACIÓN EN LA ALEACIÓN AITi

APROBADO POR:



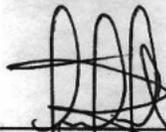
---

Prof. Ramón López  
Asesor



---

Prof. Angel Betancourt



---

Prof. José Blanco

## ÍNDICE

DEDICATORIA .....	iv
AGRADECIMIENTO .....	v
LISTA DE TABLAS .....	vi
LISTA DE FIGURAS .....	vii
LISTA DE ABREVIATURAS.....	xiii
RESUMEN .....	xiv
INTRODUCCIÓN.....	1
MARCO TEÓRICO .....	5
PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE LOS MATERIALES.....	5
Magnetización.....	5
Susceptibilidad magnética.....	5
Calor específico.....	6
CLASIFICACIÓN DE LOS MATERIALES MAGNÉTICOS.....	8
Materiales diamagnéticos.....	8
Materiales paramagnéticos.....	9
Materiales ferromagnéticos.....	11
Materiales antiferromagnéticos.....	12
Materiales ferrimagnéticos.....	13
EFFECTO DE LA TEMPERATURA EN UN MATERIAL FERROMAGNÉTICO.....	14
CAPÍTULO I.....	16

MODELO DE ISING.....	16
1.1 ASPECTOS BÁSICOS.....	16
CAPÍTULO II.....	19
METODO MONTE CARLO.....	19
2.1. ANTECEDENTES HISTÓRICOS.....	19
2.2. ASPECTOS BÁSICOS.....	19
2.3. CADENA DE MARKOV.....	20
2.4. ALGORITMO DE METRÓPOLIS.....	22
CAPÍTULO III.....	25
TEORIA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD.....	25
3.1. MODELO THOMAS-FERMI.....	25
3.2. PRIMER TEOREMA DE HOHENBERG-KOHN.....	27
3.3. SEGUNDO TEOREMA DE HOHENBERG-KOHN.....	29
3.4. ECUACIONES DE KOHN-SHAM.....	30
3.5. APROXIMACIÓN LOCAL DE LA DENSIDAD.....	34
3.6. APROXIMACIÓN LOCAL DE LA DENSIDAD DE ESPÍN... 35	
3.7. APROXIMACIÓN DEL GRADIENTE GENERALIZADO.....	36
3.8. APROXIMACIÓN MEDIANTE EL FUNCIONAL HÍBRIDO B3LYP.....	37
CAPÍTULO IV.....	41
METODOLOGÍA.....	41
4.1. DETERMINACIÓN DE LA CONSTANTE DE INTERCAMBIO.....	41
4.2. CONSTRUCCIÓN DE LA RED.....	42

4.3. CÁLCULO DE LA DISTANCIA ENTRE PRIMEROS VECINOS. ....	43
4.4. INICIALIZACIÓN DE PARAMETROS EN LA RED.....	44
4.5. TERMINALIZACIÓN O AÑEJO DE LA ESTRUCTURA. ....	45
4.6. MUESTREO Y CÁLCULO DE RESULTADOS. ....	45
RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	47
CONCLUSIONES.....	83
RECOMENDACIONES .....	87
BIBLIOGRAFÍA.....	88
APÉNDICES.....	90
APÉNDICE A. DIAGRAMA DE FLUJO DEL ALGORITMO DE METRÓPOLIS.....	90
Hoja de Metadatos.....	93

## **DEDICATORIA**

Ante todo dedico este trabajo a Dios, quien con su gran poder me ha permitido tener el honor de llegar hasta este punto con mucho orgullo y satisfacción. A mis padres, Virgilio Zabala y Zaida Lisett de Zabala, quienes con mucho esfuerzo, sacrificio y humildad, me han dado todo el amor y buena crianza así como toda su confianza y apoyo incondicional en mi deseo de ser Licenciado en Física. A mi abuela, Juana Romero de Licett, quien con sus consejos y oraciones me ha apoyado espiritualmente dándome fuerza, fe y determinación en la realización de este trabajo y en toda mi carrera. Finalmente y no menos importantes, a mis hermanos Virgilio, Félix, Jorge y Jormary que siempre han estado conmigo en las buenas y malas. Nunca terminaría de agradecerles.

## **AGRADECIMIENTO**

Quisiera agradecer a todas y cada una de las personas que hicieron posible la culminación de este trabajo, en especial:

Al profesor Ramón López, por su confianza, su apoyo y su inmejorable asesoría.

A todo el personal del Laboratorio de Metales, Laboratorio de Física Teórica y el Grupo de Física de la Materia Condensada, por toda la colaboración prestada.

A mi familia, por todo el apoyo material e inmaterial el cual es responsable de la culminación de este trabajo.

Al Departamento de Física por ser partícipe en la culminación de mi carrera y a todos mis compañeros estudiantes del mismo, en especial entre ellos a: Luis Bastardo, Elena Hernández, Jesús López, Antonio Luigi, Robert Carvajal, Janiescarlos Barreto, Tomás García y José Ramírez por toda la colaboración prestada incondicionalmente para la culminación de este trabajo.

A la Universidad de Oriente por permitirme ser un orgulloso egresado de esta casa de estudios.

## **LISTA DE TABLAS**

Tabla 1. Resultados de energías de estados singlete, triplete y constante de intercambio para la aleación AlTi.....	47
---	----

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Estructura de la aleación AlTi.....	2
Figura 2. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material diamagnético. En la parte izquierda se muestra al material sin la influencia de campo magnético externo. En la parte derecha se observa al material bajo la acción de un campo magnético orientado en la misma dirección de los espines. ....	9
Figura 3. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material paramagnético. En la parte izquierda se muestra al material sin la influencia de campo magnético externo. En la parte derecha se observa al material bajo la acción de un campo magnético orientado en la misma dirección de los espines. ....	10
Figura 4. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material ferromagnético.....	11
Figura 5. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material antiferromagnético. ....	13
Figura 6. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material ferrimagnético.....	14
Figura 7. Efecto de la temperatura sobre la magnetización en un material ferromagnético. ....	15
Figura 8. Cadena lineal de espines. ....	16
Figura 9. Un ejemplo de una configuración de espines en dos dimensiones basado en el modelo de Ising.....	19
Figura 10. Representación de la red bidimensional de átomos de titanio. ....	42
Figura 11. Red bidimensional de átomos de Ti con parámetro de red $d=0,282$	

nm. ....	44
Figura 12. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	48
Figura 13. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	49
Figura 14. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	50
Figura 15. Comportamiento del calor específico de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	51
Figura 16. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	52
Figura 17. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	53
Figura 18. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	54
Figura 19. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	55
Figura 20. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en campo externo de 0,2 T de magnitud con distintos valores	

de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock.....	56
Figura 21. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo externo de 0,2 T de magnitud con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	57
Figura 22. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo externo de 0,2 T de magnitud para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando la aproximación Hartree-Fock. ....	58
Figura 23. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo externo de 0,2 T de magnitud para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando la aproximación Hartree-Fock.....	59
Figura 24. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando el método LSDA. ....	60
Figura 25. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando el método LSDA. ....	61
Figura 26. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando el método LSDA. ....	62
Figura 27. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando el método LSDA. ....	63
Figura 28. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo con distintos valores de longitud de celda utilizando el método LSDA.....	64
Figura 29. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red	

bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando el método LSDA.....	65
Figura 30. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando el método LSDA.....	66
Figura 31. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando el método LSDA. ....	67
Figura 32. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando el método LSDA. ....	68
Figura 33. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando el método LSDA. .	69
Figura 34. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando el método LSDA. .	70
Figura 35. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando el método LSDA. ....	71
Figura 36. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP. ....	72
Figura 37. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud L=50 utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.....	73
Figura 38. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la	

temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.....	74
Figura 39. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP. ....	75
Figura 40. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP. ....	76
Figura 41. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.....	77
Figura 42. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.....	78
Figura 44. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.....	80
Figura 45. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP. ....	81
Figura 46. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud $L=50$ utilizando DFT mediante el	

funcional híbrido B3LYP. ....	82
-------------------------------	----

## LISTA DE ABREVIATURAS

DFT	Density functional theory (Teoría del funcional de la densidad).
KS	Konh-Sham.
LDA	Local density approximation (Aproximación local de la densidad).
LSDA	Local spin density approximation (Aproximación local de la densidad de espín).
GGA	Generalized gradient approximation (Aproximación de gradiente generalizado).
HF	Hartree-Fock.

## RESUMEN

Se estudiaron usando el método Monte Carlo, las propiedades magnéticas de la aleación AlTi. Se determinó la constante de intercambio para la aleación AlTi usando el esquema de Hartree-Fock la cual fue de 275,56 meV. Se realizó el mismo procedimiento usando esta vez el esquema DFT con dos aproximaciones distintas. En la aproximación mediante el método LSDA, el valor de la constante de intercambio fue de 274,01 meV. Con la aproximación mediante el funcional híbrido B3LYP la constante de intercambio fue de 54,17 meV. Se obtuvieron la energía total, magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico para un rango de temperatura entre 500 K y 800 K con el esquema de Hartree-Fock y la aproximación LSDA. Para el primer esquema la temperatura de Curie fue de  $T=636$  K y para la aproximación LSDA la temperatura de Curie fue  $T=631$  K. Se repitió el procedimiento anterior con la aproximación mediante el funcional B3LYP entre 50 K y 250 K encontrándose la temperatura de Curie en  $T=124$  K.

Los procedimientos anteriormente mencionados se hicieron además variando la longitud de celda entre  $L=20$  y  $L=50$  para todos los esquemas mencionados, encontrándose que las temperaturas de Curie determinadas coincidían cuando  $L=40$  y  $L=50$ . Se procedió de la misma forma en dicha aleación trabajando para este caso en la implementación de una pequeña perturbación por parte de un campo magnético externo de magnitud 0,2 T, lo que arrojó para el esquema Hartree-Fock y la aproximación LSDA las temperaturas de Curie  $T=642$  K y  $T=639$  K respectivamente. Para la aproximación mediante el funcional B3LYP se obtuvo una temperatura de Curie de  $T=127$  K, concluyendo así que en presencia de un campo magnético externo la temperatura de Curie aumenta.

En general se puede concluir que el modelo de Ising es un modelo que permite determinar con eficacia el punto de transición magnética en una estructura mediante el método Monte Carlo, siendo el algoritmo utilizado el de Metrópolis.

## INTRODUCCIÓN

La aleación AlTi es un sistema modelo con una estructura de tipo celda L1<sub>0</sub>, la cual tiene una modificación tetragonal de la estructura FCC. Esta aleación posee propiedades específicas, por ejemplo: baja densidad, alta dureza y una buena resistencia a la corrosión a altas temperaturas [1].

En los últimos tiempos las aleaciones han sido estudiadas con mucho interés por la comunidad científica debido a las innumerables aplicaciones que se les puede dar a las propiedades estudiadas según la necesidad de nuevas tecnologías, por ello es importante estudiarlas ya que los resultados obtenidos pueden hacer de la aleación un posible sustituto de cualquiera otra que se emplee en el mercado.

La aleación AlTi se utilizó como refinadores de grano en la industria del aluminio. Los refinadores promueven la formación de pequeños granos equiaxiales durante el proceso de solidificación del aluminio. Estas estructuras mejoran la resistencia, el agrietamiento de los lingotes y en general mejoran las propiedades mecánicas y la calidad superficial de las aleaciones de aluminio. Además, dicha aleación posee propiedades eléctricas y magnéticas, presentando variaciones a nivel de los espines que la conforman, manteniendo entre muchos casos comportamiento ferromagnético, dependiendo de las condiciones externas que influyen sobre la estructura.

Los vectores de la celda primitiva para la aleación AlTi son los siguientes:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \left(\frac{b}{2}, -\frac{b}{2}, 0\right)a \\ \vec{a}_2 &= \left(\frac{b}{2}, \frac{b}{2}, 0\right)b \\ \vec{a}_3 &= (0, 0, 1)c\end{aligned}\tag{1}$$

siendo  $a=0,4$  nm,  $b=0,4$  nm y  $c=0,4$  nm las distancias interatómicas de los átomos de titanio a lo largo de los ejes X, Y y Z respectivamente.

La estructura base de esta aleación corresponde a la del aluminio, tomando como átomos desplazados por los de titanio aquellos ubicados en las 4 caras laterales. La figura 1 muestra la estructura de esta aleación.

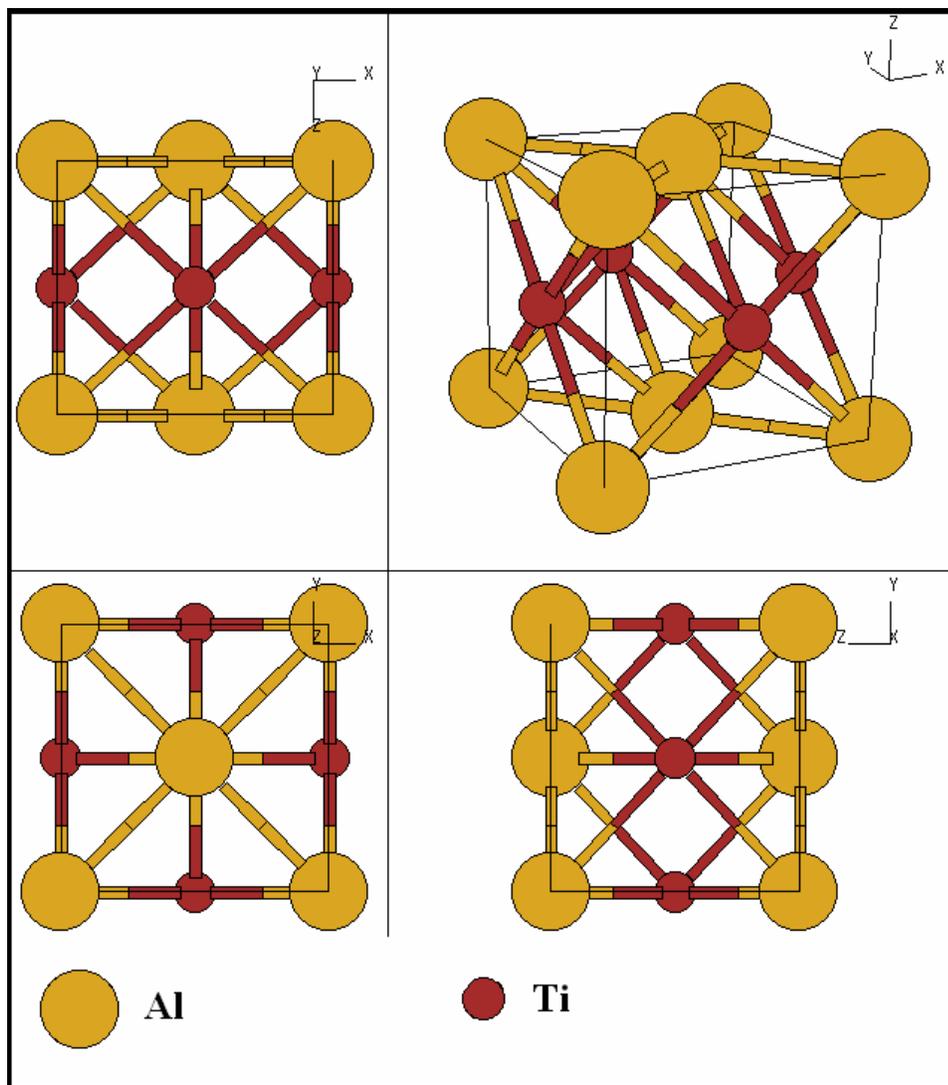


Figura 1. Estructura de la aleación AlTi.

Existen 3 tipos de formas para preparar las aleaciones AlTi que son: a) mezclado directo de aluminio y titanio en estado líquido, b) mezclado de polvo de aluminio y polvo de titanio, compactación y sintetización y c) reducción aluminotérmica, donde el aluminio líquido reacciona con  $\text{Na}_2\text{TiF}_6$  a temperaturas de 933 K-2073 K, para obtener aleaciones de AlTi con contenidos de titanio desde 0.1% hasta 95%.

Una alternativa para la obtención de aleaciones de AlTi propuesta en 1988 por varios investigadores [2] consiste en reducir el óxido de titanio por electrólisis de sales fundidas utilizando la tecnología de las celdas de reducción de alúmina Hall-Herault. Se ha reportado la formación de aleaciones de AlTi por electrólisis de sales fundidas. Estas investigaciones encontraron que las condiciones de equilibrio, en las condiciones experimentales de laboratorio, se alcanzaron a los 150 minutos de electrólisis. También se estudió la reducción de óxido de titanio disuelto en baño criolita por electrolisis y por medio de la reducción térmica, observándose que son dos mecanismos posibles para la obtención de aleaciones AlTi [3], así como la composición de los gases que salen de la celda durante la electrólisis simultánea de alúmina-óxido de titanio en celda Hall-Herault y su relación con el mecanismo del proceso [4].

Con respecto a las propiedades magnéticas de dicha aleación, no se han encontrado estudios sobre el caso, por lo que este trabajo adquiere gran importancia ya que puede servir de referencia para estudios posteriores.

Este trabajo está estructurado de la manera siguiente: en el marco teórico se presentan las propiedades magnéticas de los materiales dando un pequeño bosquejo a los diferentes tipos de materiales magnéticos. En el capítulo I se muestran las bases teóricas del modelo de Ising, en el cual se basó este trabajo, permitiendo establecer los parámetros básicos para la configuración de los espines en la aleación AlTi. En el

capítulo II, se comenta del método Montecarlo el cual permite darle el carácter aleatorio a la exploración de datos, así como el algoritmo de Metrópolis el cual utilizando el factor de Boltzmann establece los criterios para la recolección de datos para el posterior cálculo de las propiedades físicas estudiadas. En el capítulo III se muestran los postulados fundamentales de la teoría del funcional de la densidad la cual fue de crucial importancia para el cálculo de la constante de intercambio de la aleación AlTi. Por último, se presentan los procedimientos a seguir en el cálculo de la magnetización para la aleación AlTi en el capítulo IV, luego se muestran los resultados y discusión, finalmente las respectivas conclusiones y recomendaciones.

## MARCO TEÓRICO

### PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE LOS MATERIALES.

#### Magnetización.

Está definida como la densidad de momentos magnéticos dipolares en un material. Su relación está expresada de la siguiente manera:

$$\vec{M} = \frac{d\vec{\mu}_m}{dV} \quad (2)$$

Donde  $\vec{\mu}_m$  representa el momento magnético asociado a cada espín y V es el volumen del material en cuestión.

Cada electrón posee un momento magnético intrínseco cuyo valor está expresado en términos del magnetón de Bohr  $\mu_B$ . Es por ello que en un material, a medida que los espines de dichos electrones van ordenándose, los valores de los momentos magnéticos van sumándose entre sí, creándose un efecto neto de atracción o repulsión según sea el caso. En este punto se dice que el material está magnetizado, lo cual puede ocurrir si sobre él actúa un campo magnético externo.

#### Susceptibilidad magnética.

Es la magnitud física que relaciona la magnetización adquirida en un material y el campo magnético externo aplicado sobre este. Esta propiedad magnética adimensional, establece el grado de magnetización de la estructura, permitiendo una

clasificación según su valor.

Su expresión es la siguiente:

$$\chi_m = \frac{\partial \bar{M}}{\partial H} \quad (3)$$

siendo  $\bar{M}$  la magnetización del material y  $\bar{H}$  el campo magnético externo aplicado.

### **Calor específico.**

Es la cantidad de calor que hay que suministrar a una unidad de masa de una sustancia o sistema termodinámico para elevar su temperatura en una unidad. Su expresión es:

$$C_V = \frac{1}{N} \frac{\partial E}{\partial T} \quad (4)$$

siendo N el número de átomos de la estructura, E la energía total y T la temperatura.

Aunque el calor específico no es una propiedad magnética de los materiales, es importante mencionarla puesto que dicha propiedad guarda una relación con la magnetización la cual es utilizada para hallar la temperatura de transición magnética o de Curie.

En la práctica debemos considerar al material como un sistema discreto de N átomos distribuidos de una cierta forma. Es por ello que se tiende a establecer estadísticamente para cada propiedad una expresión más apropiada [5]. En general

para este tipo de sistemas se puede calcular una propiedad cualquiera según la expresión:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N A_i e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i}} \quad (5)$$

siendo  $\langle A \rangle$  el valor promedio de una propiedad A cualquiera del sistema.  $E_i$  es la energía total en un sitio i de la red,  $A_i$  es la propiedad medida en ese sitio,  $\beta=1/K_B T$ , con T la temperatura y  $K_B$  la constante de Boltzmann.

Es fácil ver que para las propiedades antes mencionadas existen expresiones más apropiadas las cuales son definidas mediante las siguientes relaciones:

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N m_i e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i}} \quad (6)$$

$$\langle X_m \rangle = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (7)$$

$$\langle C_V \rangle = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{NkT^2} \quad (8)$$

siendo  $\langle M \rangle$ ,  $\langle X_m \rangle$  y  $\langle C_V \rangle$  los valores promedio de la magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico respectivamente.  $m_i$  representa el momento magnético de espín del electrón ubicado en el sitio i el cual viene expresado por la siguiente relación:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sqrt{\sigma_i^2} \quad (9)$$

El símbolo  $\sigma_i$  representa el valor del espín del electrón que puede ser 1 o -1 según sea el caso.

## CLASIFICACIÓN DE LOS MATERIALES MAGNÉTICOS.

Cuando los electrones se mueven en un hilo conductor se genera un campo magnético alrededor del hilo. El magnetismo de los materiales también es debido al movimiento de los electrones, pero en este caso los campos y fuerzas magnéticas son causados por el espín de los electrones y su movimiento orbital alrededor del núcleo. Cada electrón que gira alrededor de su propio eje se comporta como un dipolo magnético y posee un momento dipolar denominado magnetón de Bohr  $\mu_B$ . Este momento dipolar tiene su valor igual a:

$$\mu_B = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T} \quad (10)$$

en unidades del sistema internacional de unidades (SI).

Dependiendo de los tipos de estructuras electrónicas de los materiales, estos se clasifican en diferentes tipos [6].

### **Materiales diamagnéticos.**

Un campo magnético externo que actúa sobre los átomos de un material

desequilibra ligeramente los electrones de los orbitales y crea pequeños dipolos magnéticos en los átomos que se oponen al campo aplicado. Esta acción produce un efecto magnético negativo conocido como diamagnetismo (fig. 2). El diamagnetismo produce una susceptibilidad magnética negativa muy débil, del orden de  $\chi_m = 10^{-6}$ . El diamagnetismo ocurre en todos los materiales, pero en muchos de ellos el efecto magnético negativo queda cancelado por efectos magnéticos positivos.

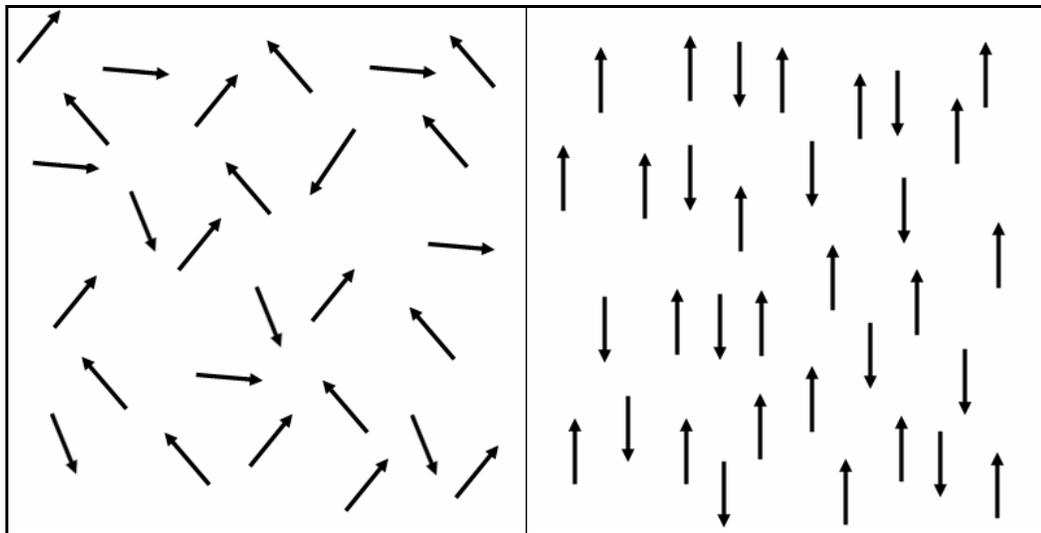


Figura 2. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material diamagnético. En la parte izquierda se muestra al material sin la influencia de campo magnético externo. En la parte derecha se observa al material bajo la acción de un campo magnético orientado en la misma dirección de los espines.

### **Materiales paramagnéticos.**

Los materiales que presentan una pequeña susceptibilidad magnética positiva por la presencia de un campo magnético externo se denominan paramagnéticos y al efecto magnético se le denomina paramagnetismo. Se produce por la alineación individual de los momentos dipolares magnéticos de los átomos o moléculas bajo la acción de un campo magnético aplicado. El efecto paramagnético produce

susceptibilidades magnéticas en los materiales en un rango de  $10^{-6}$  hasta  $10^{-2}$  y se produce en muchos materiales.

El efecto paramagnético en los materiales desaparece cuando se elimina el campo magnético aplicado (fig. 3). Así también se puede observar que la agitación térmica distribuye aleatoriamente la dirección de los dipolos magnéticos, un incremento en la temperatura disminuye el efecto paramagnético.

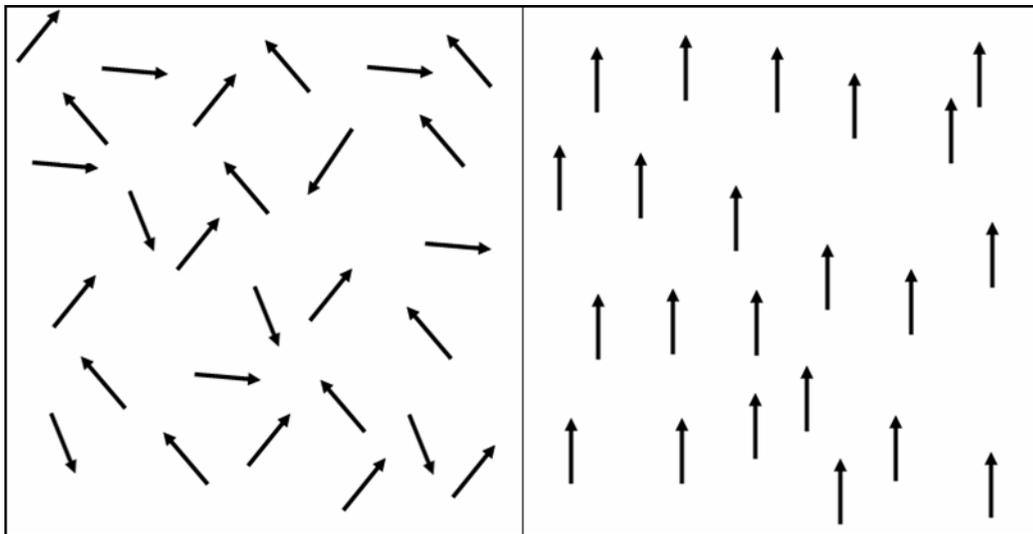


Figura 3. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material paramagnético. En la parte izquierda se muestra al material sin la influencia de campo magnético externo. En la parte derecha se observa al material bajo la acción de un campo magnético orientado en la misma dirección de los espines.

Los átomos de algunos elementos de transición y tierras raras poseen capas internas parcialmente llenas con electrones desapareados. Estos electrones internos desapareados en los átomos, como no se están oponiendo a otros electrones ligados, causan fuertes efectos paramagnéticos y además, en algunos casos, producen efectos ferromagnéticos y ferrimagnéticos muy fuertes, que serán discutidos seguidamente.

### **Materiales ferromagnéticos.**

Los efectos diamagnéticos y paramagnéticos son inducidos por un campo magnético aplicado, y la imanación permanece solo mientras se mantenga el campo. Un tercer tipo de magnetismo, denominado ferromagnetismo, es de gran importancia. Los materiales ferromagnéticos producen campos magnéticos que pueden mantenerse o eliminarse a voluntad (fig. 4).

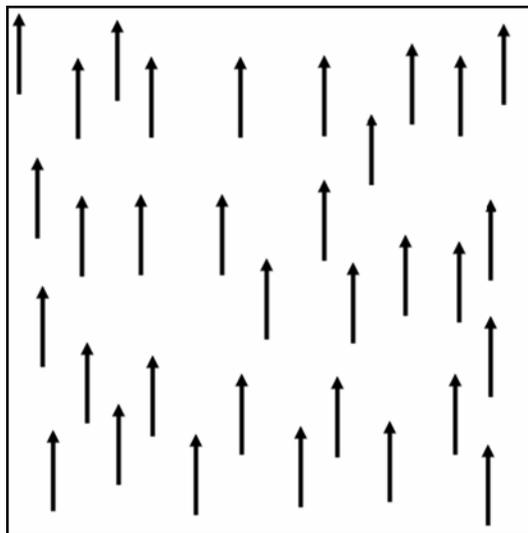


Figura 4. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material ferromagnético.

Los elementos ferromagnéticos más importantes son el hierro (Fe), el cobalto (Co) y el níquel (Ni). Las propiedades ferromagnéticas son debidas al modo en que los espines de los electrones internos desapareados se alinean en la red cristalina. Las capas internas de átomos individuales se llenan con pares de electrones con espines opuestos, y de esta forma no queda ningún momento dipolar magnético debido a ellos. En los sólidos, los electrones de valencia de la capa más externa se combinan unos con otros formando enlaces químicos de forma que no queda ningún momento magnético significativo debido a estos electrones. En los elementos Fe, Co

y Ni los electrones de la capa 3d son los responsables del ferromagnetismo que presentan estos elementos. El átomo de hierro posee cuatro electrones 3d desapareados, el átomo de cobalto tres y el átomo de níquel dos.

En una muestra sólida de Fe, Co o Ni a temperatura ambiente, los espines de los electrones 3d de átomos adyacentes se alinean en una dirección paralela por un fenómeno denominado imanación espontánea. Esta alineación paralela de dipolos magnéticos atómicos ocurre sólo en regiones microscópicas denominadas dominios magnéticos. Si los dominios están orientados aleatoriamente, entonces no se generará imanación neta en una muestra masiva. La alineación paralela de los dipolos magnéticos en los átomos de Fe, Co y Ni es debido a la formación de un intercambio positivo de energía entre ellos.

### **Materiales antiferromagnéticos.**

En presencia de un campo magnético, en algunos materiales los dipolos magnéticos de los átomos de los materiales se alinean por sí mismos en direcciones opuestas (fig.5) ocurriendo el antiferromagnetismo.

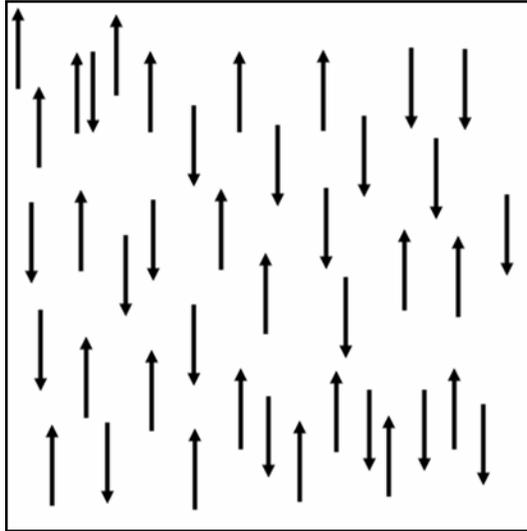


Figura 5. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material antiferromagnético.

Los elementos manganeso y cromo en estado sólido y a temperatura ambiente son ejemplos de materiales antiferromagnéticos.

### **Materiales ferrimagnéticos.**

En algunos materiales cerámicos, iones diferentes poseen distintas magnitudes para sus momentos magnéticos y cuando estos momentos magnéticos se alinean de forma antiparalela, se produce un momento magnético neto en una dirección (fig. 6). Como grupo, los materiales ferrimagnéticos se denominan ferritas.

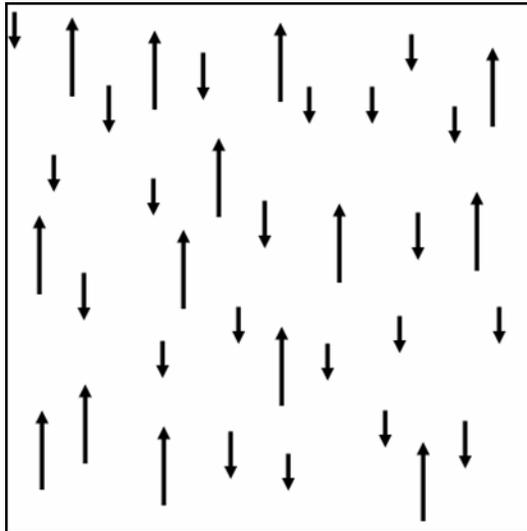


Figura 6. Alineamiento de los dipolos magnéticos para un material ferrimagnético.

Hay muchos tipos de ferritas. Un grupo se basa en la magnetita,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , que es la antiguamente conocida piedra magnética. Las ferritas poseen baja conductividad, que la hacen útil para muchas aplicaciones electrónicas.

### **EFEECTO DE LA TEMPERATURA EN UN MATERIAL FERROMAGNÉTICO.**

La energía térmica hace que los dipolos magnéticos de un material ferromagnético se desvíen de su alineamiento. Al aumentar la temperatura, se alcanza una temperatura en la cual el ferromagnetismo de los materiales ferromagnéticos desaparece completamente, y el material se toma paramagnético. Esta temperatura se denomina temperatura de Curie (fig. 7).

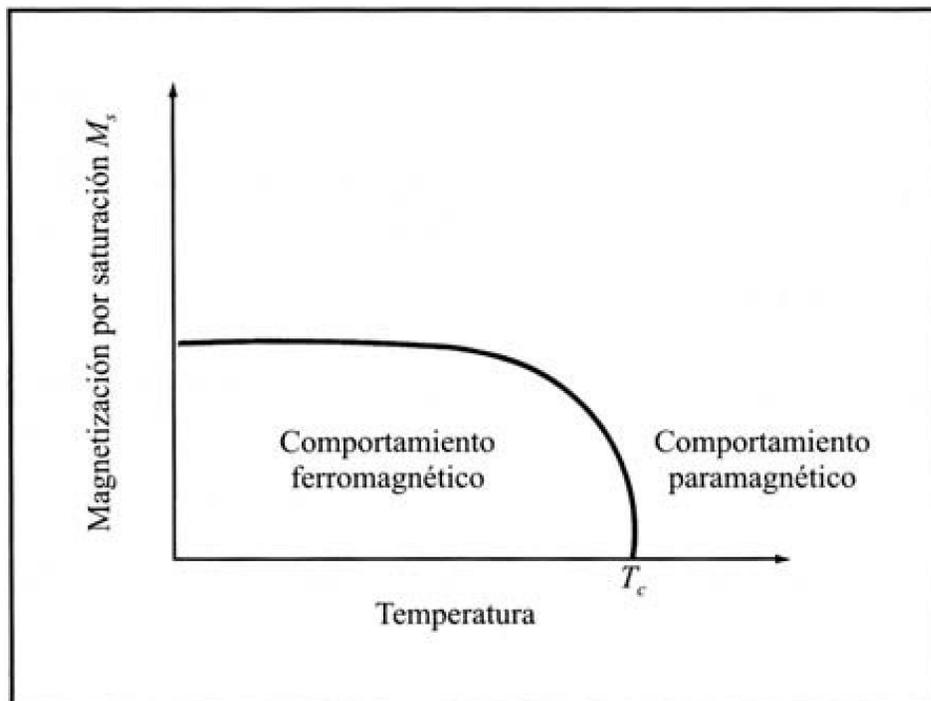


Figura 7. Efecto de la temperatura sobre la magnetización en un material ferromagnético.

Cuando una muestra de material ferromagnético es enfriada por debajo de su temperatura de Curie, se vuelven a formar los dominios ferromagnéticos y el material se vuelve ferromagnético nuevamente. Las temperaturas de Curie del Fe, Co y Ni son 1043, 1396 y 631 °C, respectivamente.

# CAPÍTULO I.

## MODELO DE ISING.

### 1.1 ASPECTOS BÁSICOS.

Consideremos una secuencia de  $n$  puntos en forma de línea en la cual se le asigna a cada punto un espín que puede tomar alguna de las dos posiciones, arriba o abajo [7]. Se podría indicar a los espines según la configuración indicada en la figura 8.

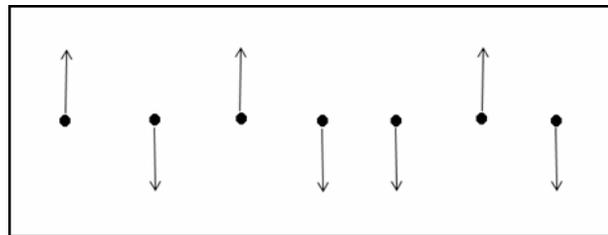


Figura 8. Cadena lineal de espines.

Se define a  $\Omega$  como un espacio de todas las secuencias

$$\Omega = (\omega_0, \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n) \quad (11)$$

donde  $\omega_j = +$  se refiere al espín orientado hacia arriba y  $\omega_j = -$  se refiere al espín orientado hacia abajo. Entonces se puede pensar en el espín  $\sigma_j$  como una función definida en  $\Omega$  con los valores  $\sigma_j(\omega) = 1$  si  $\omega_j = +$  y  $\sigma_j = -1$  si  $\omega_j = -$ . Se definió una medida de probabilidad asignando a cada configuración en  $\Omega$  una energía  $E(\omega)$  por medio de la ecuación:

$$E(\omega) = -J \sum_{i,j} \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - \mu_m \mu_0 H \sum_i \sigma_i(\omega) \quad (12)$$

donde  $\mu_m$  es el momento magnético asociado a un espín y  $\mu_0$  es la permeabilidad magnética en el vacío.

Esta primera sumatoria representa la energía de interacción entre los espines. Se hizo la simplificación de que esta interacción sería sólo entre primeros vecinos, condición que es respetada haciendo la máxima diferencia entre los índices  $i$  y  $j$  igual a 1. La constante  $J$  es denominada constante de intercambio y es propia de la interacción entre espines. El caso  $J > 0$  es el caso atractivo, denominado así ya que los espines que interaccionan se mantienen alineados en el mismo sentido. En el caso cuando  $J < 0$ , tenemos el caso repulsivo, donde se tiende a reforzar los pares de interacciones en que los espines tienden a mantenerse alineados en orientación opuesta entre sí. El segundo término de la sumatoria representa la interacción de los espines sometidos a un campo magnético de intensidad  $H$ . La constante  $\mu_m > 0$  es una propiedad del material. En el caso atractivo, el primer término representa la contribución a la energía mínima cuando todos los espines están alineados hacia arriba en la misma dirección. El segundo término es una contribución a la energía mínima cuando todos los espines están alineados en la misma dirección al campo magnético externo aplicado.

Ising entonces asignó probabilidades a las configuraciones  $\omega$  proporcionales al factor de Boltzmann:

$$e^{-\beta E(\omega)} \quad (13)$$

donde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , T es la temperatura del sistema y  $k_B$  la constante de Boltzmann.

La probabilidad medida en  $\omega$  es por lo tanto tomada como

$$P(\omega) = \frac{e^{-\beta E(\omega)}}{Z} \quad (14)$$

donde la constante de normalización Z está definida como

$$Z = \sum_{\omega} e^{-\beta E(\omega)} \quad (15)$$

y es la función de partición.

Una manera usual de pensar en esta medida es la siguiente. Vamos a asociar a cada punto  $i$  una energía  $E_i$  igual a

$$E_i(\omega) = -\frac{J}{2} \sum_{|j-i|=1} \sigma_i(\omega) \sigma_j(\omega) - \mu_m \mu_0 H \sigma_i(\omega) \quad (16)$$

luego

$$P(\omega) = \frac{1}{Z} \prod_i e^{-\beta E_i(\omega)} \quad (17)$$

es la probabilidad normalizada asociada a una configuración dada del sistema. De tal modo que la probabilidad asociada a un sitio del sistema está definida por la expresión:

$$P_i(\omega) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i(\omega)} \quad (18)$$

estando  $E_i(\omega)$  definida por la ecuación (16).

Por lo tanto, la probabilidad relativa de una configuración es simplemente obtenida considerando todos los puntos y usando la energía de cada punto para determinar la medida de ese punto.

Es posible hacer estas mismas suposiciones considerando en vez de una línea unidimensional, una configuración de dos o más dimensiones. Cada punto  $i$  es luego reemplazado por un conjunto de pares de coordenadas  $(i,j)$  siendo estos últimos enteros. Una típica configuración de esta red está mostrada en la figura 9. La energía definida en (16) permite la interacción entre un punto y sus vecinos con la probabilidad definida exactamente por las expresiones (14), (17) y (18). Note que un punto en dos dimensiones tendrá normalmente 4 vecinos a menos que éste se encuentre en las fronteras o límites de la red, donde el número de vecino será 2 o 3.

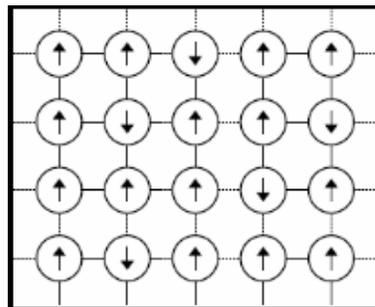


Figura 9. Un ejemplo de una configuración de espines en dos dimensiones basado en el modelo de Ising.

## **CAPÍTULO II.**

### **METODO MONTE CARLO.**

#### **2.1. ANTECEDENTES HISTÓRICOS.**

En el año 1949, en el laboratorio de Los Álamos se planteó un problema de difícil solución. Se trataba de determinar el recorrido de los neutrones en diferentes medios. Una solución que recurriese a los procedimientos clásicos resultaría laboriosa y complicada. Los técnicos conocían los datos fundamentales que se necesitaban para resolver el problema; sin embargo, la dificultad surgía al tratar de relacionar los datos en una sola fórmula. Ulam y Neumann idearon una solución que esencialmente consistía en que una ruleta resolviera el problema propuesto. Se fueron agrupando las probabilidades de los distintos sucesos, obteniéndose una solución que quedaba dentro de la aproximación exigida por los técnicos.

Cuando fue necesario darle un nombre al método empleado, se le denominó Monte Carlo [8]. Sin embargo, la técnica matemática empleada era ya conocida con anterioridad.

#### **2.2. ASPECTOS BÁSICOS.**

En ocasiones el problema que se trata de resolver es la solución de una ecuación complicada y utilizando los métodos ordinarios no se resolvería dentro de un tiempo especificado, será necesario entonces intentar algún procedimiento estadístico que proporcione la solución del problema.

Como inconvenientes del método Monte Carlo, podemos decir que en

ocasiones es necesario realizar un gran número de cálculos, por lo que puede resultar prohibitivo desde el punto de vista económico y por otra parte los resultados son sólo aproximados.

El método Monte Carlo está basado en la idea de un muestreo aleatorio repetido del espacio de búsqueda y de la aplicación de estadística para calcular el valor buscado. Este método tiende a ser usado generalmente cuando es ineficaz o imposible calcular un resultado exacto con un algoritmo determinístico.

La generación de números aleatorios permite el muestreo o exploración de todos los rincones de cualquier espacio de configuraciones.

### 2.3. CADENA DE MARKOV.

Consideremos un sistema en el cual la evolución del mismo está descrita por estados  $X$ , y que se va de un estado a otro como una cadena de estados:

$$X_0 \rightarrow X_1 \rightarrow X_2 \rightarrow \dots \rightarrow X_n \quad (19)$$

de manera que se pueda establecer la probabilidad de un estado a otro:

$$X_{n-1} \rightarrow X_n \quad (20)$$

como:

$$P(X_n | X_{n-1}, \dots, X_0) \quad (21)$$

en la cual un estado del sistema depende de su estado previo.

Una cadena de Markov o proceso de Markov es un sistema donde la probabilidad de un estado moviéndose a un próximo estado específico ( $X_{n-1} \rightarrow X_n$ ) solo es dependiente del estado previo  $X_{n-1}$  [9].

$$P(X_n | X_{n-1}, \dots, X_0) = P(X_n | X_{n-1}) \quad (22)$$

en donde la probabilidad de un estado específico  $X_0$  a un estado  $X_n$  es:

$$P(X_0, \dots, X_n) = P(X_n | X_{n-1}) P(X_{n-1} | X_{n-2}) \dots P(X_1 | X_0) P(X_0) \quad (23)$$

$$= P(X_n | X_{n-1}) P(X_{n-1} | X_{n-2}) \dots P(X_1 | X_0) a_0 \quad (24)$$

donde  $a_0$  es la probabilidad asociada al estado inicial  $X_0$ .

Supongamos que por algún procedimiento matemático se pueden ubicar aleatoriamente los puntos en el espacio de la red de un material de acuerdo a la distribución de probabilidad de la ecuación (14), esto significa que en promedio una propiedad A del sistema puede ser definida como:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \quad (25)$$

Donde  $N$  es el número de puntos en el espacio,  $A_i$  es la propiedad medida en

el sitio  $i$  de la red y  $\langle A \rangle$  es el valor promedio de dicha propiedad en el sistema.

Generar aleatoriamente la ubicación de puntos en el espacio no es el mejor método, pues como la probabilidad  $P(\omega)$  es proporcional al factor de Boltzmann  $e^{-\beta E(\omega)}$ , los puntos que tienen baja energía contribuirán significativamente, mientras que los de alta energía tendrán un bajo peso relativo. La clave entonces está en utilizar un procedimiento que genere sólo puntos con un alto peso relativo, esto fue lo que resolvió Metrópolis con el algoritmo que lleva su nombre.

#### 2.4. ALGORITMO DE METRÓPOLIS.

Es un proceso de Markov en el cual se construye una caminata aleatoria de tal modo que la probabilidad de visitar un punto en particular de un espacio de configuraciones en un sistema es proporcional al factor de Boltzmann.

Es importante destacar que hay varias maneras de construir la caminata aleatoria. El algoritmo de Metrópolis es sólo una de ellas.

Consideremos la transición entre dos estados  $a$  y  $b$ , donde la probabilidad de que el sistema esté en el estado  $a$  es  $P_a$  y de que este en el estado  $b$  es  $P_b$ . En el equilibrio se cumple la condición del balance detallado, y por lo tanto:

$$W_{ab}P_a = W_{ba}P_b \quad (26)$$

donde  $W_{ab}$  es la probabilidad de que la transición ocurra del estado  $a$  al estado

b y  $W_{ba}$  es la probabilidad de que la transición ocurra del estado b al estado a.

Por otro lado, sabemos que en el equilibrio la probabilidad de encontrar al sistema en a o en b es proporcional a  $e^{-\beta E_a(\omega)}$  o  $e^{-\beta E_b(\omega)}$  respectivamente, luego:

$$\frac{P_a}{P_b} = e^{-\beta \Delta E_{ab}(\omega)} \quad (27)$$

reemplazando (26) en (27) tenemos

$$\frac{W_{ba}}{W_{ab}} = e^{-\beta \Delta E_{ab}(\omega)} \quad (28)$$

Así, vemos que la probabilidad de transición entre dos estados posibles está determinada por el factor de Boltzmann. Esto nos da la clave de cómo escoger la configuración. Si en la transición del estado a al estado b, el cambio de energía  $\Delta E_{ab}$  es menor que cero, entonces  $W_{ba}$  es igual a 1, pero si  $\Delta E_{ab}$  es mayor que cero, entonces  $W_{ba}$  es proporcional al factor de Boltzmann. En este último caso comparamos  $W_{ba}$  con un número  $\alpha$  en el rango  $[0,1]$  generado aleatoriamente. Si  $W_{ba} \geq \alpha$  se acepta la movida, de lo contrario se rechaza.

En la práctica, si tenemos un sistema de N partículas sometidas a una temperatura T, el algoritmo de Metrópolis se implementará así:

1. Se selecciona al azar una partícula ubicada en un sitio i del sistema y se

calcula su energía  $E(\mathbf{r})$ .

2. Se le da a la partícula un desplazamiento  $\vec{r}' = \vec{r} + \Delta\vec{r}$  y se calcula su nueva energía  $E(\mathbf{r}')$ .

3. Si  $\Delta E \leq 0$ , se acepta la movida y se regresa al paso 1.

Si  $\Delta E > 0$ , se escoge un número  $\alpha$  al azar en el rango  $[0,1]$ :

- Si  $\alpha \leq e^{-\beta\Delta E}$ , se acepta la movida y se regresa al paso 1.
- $\alpha > e^{-\beta\Delta E}$ , se rechaza la movida, es decir, se conserva la posición de la partícula ubicada en el sitio  $i$  y se regresa al paso 1.

4. Luego de recorrer las  $N$  partículas, se guarda la configuración obtenida y se regresa al paso 1 para comenzar otro ciclo. Después de un número de veces establecido, se procede al paso 5.

5. Se calcula las propiedades de interés a partir de las configuraciones guardadas.  
Fin.

## CAPÍTULO III.

### TEORIA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD.

La densidad electrónica  $\rho(\vec{r})$  representa el número de electrones por unidad de volumen de una molécula o átomo ubicado a una posición  $\vec{r}$ . La idea de esta definición es de fundamental importancia para el estudio de la energía del estado estacionario de un sistema formado por N partículas, y en este caso es la piedra fundamental de esta teoría. A continuación presentamos un breve resumen de los modelos que dieron forma a esta teoría culminando en su formalismo moderno.

La teoría del funcional de la densidad es conocida también como DFT por sus siglas en inglés (Density theory functional) y su propósito es el de reemplazar la función de onda de N electrones  $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$  y el hamiltoniano en el método Hartree-Fock por un hamiltoniano en términos de la densidad electrónica [10].

#### 3.1. MODELO THOMAS-FERMI.

Esta teoría comienza con los trabajos de Thomas y Fermi en 1927 y 1928 respectivamente en forma independiente. Ellos usaron consideraciones estadísticas para aproximar la distribución de electrones en un átomo dividiendo el espacio en pequeños cubos de longitud  $L=1$  y volumen  $\Delta V = 1$  conteniendo cada uno un número fijo de electrones. Entonces se asumió que los electrones en cada cubo se mueven independientemente entre sí. De esta manera se definió la contribución a la energía cinética que se expresa de la manera siguiente:

$$T[\rho] = C_F \int \rho(\mathbf{r})^{5/3} d\mathbf{r} \quad (28)$$

donde  $C_F = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} = 2,871 \text{ H (Hartree)}$ ;  $1\text{H}=27,2116 \text{ eV}$

De esta forma Thomas y Fermi establecieron la energía de un sistema electrónico en función de su densidad:

$$E_{TF} = C_F \int \rho(\mathbf{r})^{5/3} d\mathbf{r} + \int \rho(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (29)$$

Allí el primer término de la ecuación es la contribución a la energía cinética, el segundo es la contribución a la energía por parte de la interacción de los electrones con un potencial externo  $V(\mathbf{r})$  y el tercer término es la contribución a la energía por parte de la interacción repulsiva entre electrones también llamado contribución de Hartree o término de Hartree, en el cual  $\rho(\mathbf{r})$  y  $\rho(\mathbf{r}')$  representan la densidad electrónica de dos electrones interactuantes y  $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$  la distancia entre los mismos.

Innumerables modificaciones del modelo Thomas-Fermi han sido propuestas. Desafortunadamente este modelo no trabaja bien cuando se aplica a moléculas. Esta falla, adicionada al hecho que la precisión para átomos no es tan alta como la obtenida con otros métodos, causó que se idearan otras formas de mejorarlo.

La situación cambió desde ese entonces. Un año después nació un teorema fundamental mostrando que para estados estacionarios el modelo Thomas-Fermi

puede ser considerado como una aproximación de una teoría exacta denominada teoría del funcional de la densidad.

### 3.2. PRIMER TEOREMA DE HOHENBERG-KOHN.

Este teorema legitima el uso de la densidad electrónica como variable básica [11].

Teorema 1: “El potencial externo está únicamente definido por la densidad electrónica”.

La demostración de este teorema fue simple. Usando el principio de mínima energía, Hohenberg y Kohn demostraron por reducción al absurdo que si se tienen dos sistemas con  $N$  electrones e igual densidad electrónica, estos deben tener el mismo potencial  $V(\vec{r})$ . Por lo tanto, partiendo del principio de que los potenciales son distintos para una misma densidad obtuvieron el siguiente absurdo:

$$E_0 + E_0^f < E_0^f + E_0 \quad (30)$$

De esta manera se comprobó que una densidad  $\rho(\vec{r})$  solo puede tener un potencial único  $V(\vec{r})$ .

Por lo tanto, teniendo  $\rho(\vec{r})$ ,  $N$  y  $V(\vec{r})$  se puede calcular cualquier propiedad del estado estacionario como la energía cinética  $T[\rho]$ , la energía potencial  $V[\rho]$  y la

energía total  $E[\rho]$ .

Definimos entonces la energía variacional  $E[\rho]$  de la siguiente forma:

$$E_v[\rho] = T[\rho] + V_{ne}[\rho] + V_{ee}[\rho] \quad (31)$$

donde  $T[\rho]$  es la contribución a la energía total por parte de la energía cinética,  $V_{ne}[\rho]$  es la contribución por parte de la interacción atractiva entre los electrones y los núcleos y  $V_{ee}[\rho]$  la contribución a la interacción repulsiva entre electrones.

Otra forma de expresarla es:

$$E_v[\rho] = V_{ne}[\rho] + F[\rho] \quad (32)$$

donde  $F[\rho]$  es el funcional de la densidad que tiene la siguiente expresión:

$$F[\rho] = T[\rho] + V_{ee}[\rho] \quad (33)$$

donde el término repulsivo está expresado como:

$$V_{ee}[\rho] = J[\rho] + \text{término no clásico} \quad (34)$$

allí,  $J[\rho]$  representa la contribución a la energía total por parte de la repulsión clásica.

El término no clásico es de fundamental importancia ya que contiene la mayor parte de la energía de intercambio y correlación. Notamos también que  $E[\rho]$  es definido de forma independiente del potencial  $V(\mathbf{r})$  lo que nos dice entonces que es un funcional universal de  $\rho(\mathbf{r})$ .

### 3.3. SEGUNDO TEOREMA DE HOHENBERG-KOHN.

Teorema 2: “Sea  $\rho(\mathbf{r})$  una densidad no negativa y normalizada para N, se define la energía variacional de un sistema electrónico y esta es por definición mayor o igual a la energía en el estado fundamental”

Todo esto se resume en la siguiente relación:

$$E_0 \leq E_v[\rho] \quad (35)$$

siendo  $E_0$  la energía del estado fundamental y  $E_v[\rho]$  la energía variacional definida por la ecuación (32).

Asumiendo la diferenciabilidad de  $E_v[\rho]$ , el principio variacional requiere que la densidad del estado estacionario satisfaga la siguiente relación según el principio de mínima energía:

$$\delta\{E_v[\rho] - \mu[\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - N]\} = 0 \quad (36)$$

Lo cual nos da la ecuación de Euler-Lagrange con la siguiente solución:

$$\mu = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} = V(\vec{r}) + \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (37)$$

donde  $\mu$  es el potencial químico. Esta ecuación es la piedra fundamental de la teoría del funcional de la densidad.

### 3.4. ECUACIONES DE KOHN-SHAM.

En 1965 Kohn y Sham idearon una ingeniosa aproximación indirecta al funcional de la energía cinética  $T[\rho]$  al cual se denominó luego como método Kohn Sham (KS).

Partiendo de la definición de la energía cinética para un gas homogéneo de electrones tenemos:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N n_i \langle \phi_i | \nabla^2 | \phi_i \rangle \quad (38)$$

de donde se puede obtener la matriz densidad del sistema que viene expresada según:

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{i=1}^N n_i \phi_i^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}') \quad (39)$$

donde  $\phi_i$  y  $n_i$  son la función de onda de los electrones u orbitales mono electrónicos y su correspondiente número de ocupación.  $\nabla^2$  es el operador

laplaciano y  $\hbar$  representa la constante de Planck  $h$  dividida entre  $2\pi$  [12].

Se puede establecer entonces el hamiltoniano para un sistema de electrones según la siguiente expresión:

$$H_s = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_s(\vec{r}_i) \right] \quad (40)$$

en la cual no está incluido el término de repulsión electrón-electrón, haciendo notar que en el estado estacionario la densidad es exactamente  $\rho$ .

Para este sistema la función de onda en el estado estacionario  $\Phi_s$  es determinada por el determinante de Slater:

$$\Phi_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{Det}[\phi_1 \phi_2 \phi_3 \dots \phi_N] \quad (41)$$

Para este sistema Kohn y Sham consideraron al sistema como de conchas cerradas en las cuales existen sólo dos electrones por orbital y no hay electrones desapareados. En esta consideración:

$$N = 2N_s \quad (42)$$

Siendo  $N_s$  el número de orbitales y  $N$  el número total de electrones. En este caso el número de ocupación es 2 si  $i < N_s$  y es cero en el resto de los casos para la ecuación (42).

Esto los llevó a expresar la densidad de la siguiente forma:

$$\rho(\vec{r}) = 2 \sum_{i=1}^{N/2} |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (43)$$

con lo que la energía cinética es redefinida sólo para electrones no interactuantes según la siguiente expresión:

$$T_s[\rho] = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N/2} n_i \langle \phi_i | \nabla^2 | \phi_i \rangle \quad (44)$$

La idea de Kohn y Sham fue ajustar un problema de interés asumiendo que  $T_s[\rho]$  es exactamente una componente de la energía cinética.

Ellos entonces definieron al funcional de la densidad como:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (45)$$

donde

$$E_{xc}[\rho] = T[\rho] - T_s[\rho] + V_{ee}[\rho] - J[\rho] \quad (46)$$

La cantidad  $E_{xc}[\rho]$  es llamada energía de intercambio y correlación.

Aplicando el principio de mínima energía definido por la ecuación (36), nos da la solución según solución a la ecuación de Euler Lagrange:

$$\mu = \frac{\delta E_v[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} = V_{ef}(\vec{r}) + \frac{\delta T_s[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (47)$$

siendo  $V_{\text{ef}}(\vec{r})$  el potencial efectivo definido por:

$$V_{\text{ef}}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} + V_{\text{xc}}(\vec{r}) \quad (48)$$

donde  $V_{\text{xc}}(\vec{r})$  es el potencial de intercambio y correlación definido como:

$$V_{\text{xc}}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{\text{xc}}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (49)$$

El método Kohn-Sham trabaja como sigue:

Para un potencial efectivo dado  $V_{\text{ef}}(\vec{r})$  se obtiene  $\rho(\vec{r})$  que satisfaga la ecuación de Euler-Lagrange y se resuelven las N ecuaciones de un electrón:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ef}}(\vec{r}) \right] \Phi_i = E_i \Phi_i \quad (50)$$

Se inicia con un supuesto  $\rho(\vec{r})$ , luego se construye el potencial efectivo  $V_{\text{ef}}(\vec{r})$  según la ecuación (48), y se halla un nuevo  $\rho'(\vec{r})$ . Si  $\rho(\vec{r}) = \rho'(\vec{r})$  entonces se detiene el ciclo, de lo contrario se empieza de nuevo. Este proceso es llamado cálculo autoconsistente. Las cuatro ecuaciones anteriores son las célebres ecuaciones de Kohn Sham las cuales aún siguen vigentes en su forma original, aunque la forma exacta del potencial de intercambio y correlación no es conocida. Existen ciertas aproximaciones que se hicieron para solventar este inconveniente.

### 3.5. APROXIMACIÓN LOCAL DE LA DENSIDAD.

Esta aproximación conocida como LDA por sus siglas en inglés (Local density approximation) es la más simple y fue introducida por Kohn y Sham, en ella la energía de intercambio y correlación tiene la siguiente expresión:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{xc} d\vec{r} \quad (51)$$

donde  $\epsilon_{xc}$  es la energía de intercambio y correlación por partícula de una gas de electrones homogéneo de densidad  $\rho(\vec{r})$ .

El potencial de intercambio y correlación sería entonces:

$$V_{xc}^{LDA}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} = \epsilon_{xc}(\rho(\vec{r})) + \rho(\vec{r}) \frac{\partial \epsilon_{xc}(\rho(\vec{r}))}{\partial \rho(\vec{r})} \quad (52)$$

Esta aproximación es aplicable a sistemas con variaciones suficientemente suaves en la densidad pero no puede ser formalmente justificada para sistemas altamente inhomogéneos.

Aquí se expresa la energía de intercambio y correlación como la suma de dos términos:

$$E_{xc}^{LDA} = E_x^{LDA} + E_c^{LDA} \quad (53)$$

El primer término es conocido como la energía de intercambio definida por Dirac como:

$$E_N^{LDA} = -\frac{2}{\pi} \left( \frac{2}{4\pi} \right)^{1/3} \int [\rho(\vec{r})]^{4/3} d\vec{r} \quad (54)$$

El segundo término es conocido como la energía de correlación y no es conocido con exactitud analíticamente.

Cuando se trata el caso donde existe polarización de los espines, es necesario hacer una aproximación adicional considerando tal caso. Esta aproximación es conocida como aproximación local de densidad y espín o LSDA.

### 3.6. APROXIMACIÓN LOCAL DE LA DENSIDAD DE ESPÍN.

Esta aproximación conocida como LSDA por sus siglas en inglés (Local spin density approximation) mantiene los criterios de localidad y homogeneidad en los sistemas electrónicos igual que en el caso LDA solamente adicionando la condición de polarización de los espines.

En este caso, se asume que las densidades electrónicas de espín arriba  $\rho_{\uparrow}(\vec{r})$  y espín abajo  $\rho_{\downarrow}(\vec{r})$  son independientes, de modo que la densidad del sistema se puede expresar como:

$$\rho(\vec{r}) = \rho_{\uparrow}(\vec{r}) + \rho_{\downarrow}(\vec{r}) \quad (55)$$

Con lo que cada una de las densidades satisface las ecuaciones de Kohn-Sham.

Estas densidades se construyen a partir de los orbitales según

$$\rho_s(\mathbf{r}) = 2 \sum_{i=1}^{N_s} |\phi_{i,s}(\mathbf{r})|^2 \quad (56)$$

donde  $N_s$  es el número de estados que tienen proyección  $s$  del espín que puede ser arriba indicado por el símbolo  $\uparrow$  o abajo indicado por  $\downarrow$  según sea el caso. Finalmente se puede expresar la magnetización  $M(\mathbf{r})$  según:

$$M(\mathbf{r}) = \rho_{\uparrow}(\mathbf{r}) - \rho_{\downarrow}(\mathbf{r}) \quad (57)$$

la cual es una propiedad característica de este caso.

Sin embargo, cuando se tratan sistemas de alta inhomogeneidad esta aproximación no genera buenos resultados por estar adaptada a sistemas homogéneos, es por ello que debido a que la densidad en forma real es inhomogénea se hicieron aproximaciones para tal caso.

### 3.7. APROXIMACIÓN DEL GRADIENTE GENERALIZADO.

Para solventar el problema de la homogeneidad en la densidad electrónica, Becke introdujo la no uniformidad en el método LDA.

Esta es la conocida aproximación del gradiente generalizado o GGA por sus siglas en inglés (Generalized gradient approximation). En este método la energía de intercambio y correlación tiene la siguiente expresión:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int f[\rho(\mathbf{r}), \nabla\rho(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \quad (58)$$

donde  $f[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})]$  es un funcional que depende tanto de la densidad electrónica como de su gradiente el cual es una cantidad real para la inhomogeneidad de la densidad electrónica de los sistemas finitos.

### 3.8. APROXIMACIÓN MEDIANTE EL FUNCIONAL HÍBRIDO B3LYP.

Esta aproximación está basada en una contribución hecha fundamentalmente por la mezcla de los funcionales de Becke, Lee, Yang y Parr, lo que dio como resultado una energía de intercambio y correlación híbrida que tiene la siguiente expresión:

$$E_{xc}^{B3LYP}[\rho] = E_x^{LDA} + A(E_x^{HF} - E_x^{LDA}) + BE_x^{SS} + E_c^{VWN} + C(E_c^{LYP} - E_c^{VWN}) \quad (59)$$

donde **A**, **B** y **C** son parámetros ajustables obtenidos empíricamente [13].

$E_x^{HF}$  es la energía de intercambio según el esquema Hartree-Fock desarrollada de forma local la cual tiene la siguiente expresión:

$$E_N^{HF} = -\frac{7}{8} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} b \int \rho(\vec{r})^{4/3} d\vec{r} \quad (60)$$

con  $b$  siendo un parámetros a ajustar.

$E_N^{B88}$  es la energía de intercambio utilizando el esquema de Becke que se define según:

$$E_N^{B88} = \alpha - \frac{b\tau^2}{1 + 6b\tau \sinh^{-1}(\tau)} \quad (61)$$

con  $b$  y  $\alpha$  siendo parámetros a ajustar en donde se mantiene el criterio de localidad adicionando correcciones que incluyen el gradiente.

$E_c^{LYP}$  es la energía de correlación para las aproximaciones desarrolladas por Lee, Yang y Parr con criterios de localidad y correcciones de gradiente que por definición es:

$$\begin{aligned}
E_c^{LYP} = & -a \int \frac{4}{1+d\rho^{-1/2}} \frac{\rho_\alpha \rho_\beta}{\rho} \\
& - ab \int \omega \left\{ \rho_\alpha \rho_\beta \left[ 2^{11/2} C_F (\rho_\alpha^{8/2} + \rho_\beta^{8/2}) + \left( \frac{47}{18} - \frac{7}{18} \delta \right) |\nabla \rho|^2 \right. \right. \\
& - \left. \left( \frac{5}{2} - \frac{1}{18} \delta \right) (|\nabla \rho_\alpha|^2 + |\nabla \rho_\beta|^2) \right. \\
& - \left. \left. \frac{\delta - 11}{9} \left( \frac{\rho_\alpha}{\rho} |\nabla \rho_\alpha|^2 + \frac{\rho_\beta}{\rho} |\nabla \rho_\beta|^2 \right) \right] - \frac{2}{3} \rho^2 |\nabla \rho|^2 \right. \\
& + \left. \left( \frac{2}{3} \rho^2 - \rho_\alpha^2 \right) |\nabla \rho_\beta|^2 \right. \\
& \left. + \left( \frac{2}{3} \rho^2 - \rho_\beta^2 \right) |\nabla \rho_\alpha|^2 \right\} d\rho \tag{62}
\end{aligned}$$

siendo además

$$\omega = \frac{a^{-\alpha} \rho^{-2/2}}{1+d\rho^{-1/2}} \rho^{-11/2} \tag{63}$$

$$\delta = c\rho^{-1/2} + \frac{d\rho^{-2/2}}{1+d\rho^{-1/2}} \tag{64}$$

$$C_F = 2,871H \tag{65}$$

donde **a**, **b**, **c** y **d** son parámetros a ajustar.

y  $E_c^{VWN}$  la energía de intercambio y correlación según el esquema de Vosko, Wilk y Nusair la cual mantiene un criterio tipo LSDA. Su expresión es:

$$\begin{aligned}
 E_c^{VWN} = A \left\{ \ln \left( \frac{x^2}{X(x)} \right) + \frac{2b}{Q} \operatorname{Tan}^{-1} \left( \frac{Q}{2x+b} \right) \right. \\
 \left. - \frac{bx_0}{X(x_0)} \left[ \ln \left( \frac{(x-x_0)^2}{X(x)} \right) \right. \right. \\
 \left. \left. + \frac{2(b+2x_0)}{Q} \operatorname{Tan}^{-1} \left( \frac{Q}{2x+b} \right) \right] \right\} \quad (66)
 \end{aligned}$$

donde  $x_0$ ,  $b$  y  $c$  son parámetro a ajustar definiendo además:

$$\begin{cases} X(x) = x^2 + bx + c \\ Q = (4c - b^2)^{1/2} \\ x = \rho^{1/2} \end{cases} \quad (67)$$

## CAPÍTULO IV

### METODOLOGÍA

Los cálculos para este trabajo se realizaron con la ayuda de un software en donde se simuló una red de átomos y se aplicó el método Monte Carlo mediante la ejecución del algoritmo de Metrópolis donde se calculó entre otras cosas de la magnetización de la aleación AlTi.

#### 4.1. DETERMINACIÓN DE LA CONSTANTE DE INTERCAMBIO.

Mediante el uso del paquete computacional Gaussian se simuló la estructura de la aleación AlTi utilizando los vectores de la celda primitiva de la ecuación (1) con el objeto de calcular la constante de intercambio J que viene expresada según la relación:

$$J = -\frac{E_{T1} - E_{S1}}{\sigma_{\max}(\sigma_{\max} + 1)} \quad (68)$$

donde  $E_{T1}$  y  $E_{S1}$  representan las energías totales del sistema en el estado triplete y el estado singlete respectivamente.  $\sigma_{\max} = \sigma_1 + \sigma_2$  es la suma de dos espines interactuantes  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  correspondiente a la energía  $E_{T1}$  cuya interacción da como resultado la energía de intercambio que es proporcional a J [14].

Mediante la simulación de la aleación AlTi con Gaussian se pudieron calcular las energías de los estados singlete y triplete utilizando el método

Hartree-Fock y el método DFT por un lado con la aproximación LSDA y por el otro el método DFT con la aproximación mediante el funcional híbrido B3LYP con los que se obtuvieron tres valores distintos de  $J$ . La justificación del uso de dos diferentes tipos de aproximaciones utilizando DFT obedece a la comparación de resultados de ambas aproximaciones puesto que el funcional B3LYP es de tipo híbrido en el cual se toman en cuenta además de los efectos considerados en LSDA, también se asigna gran participación a la correlación.

#### 4.2. CONSTRUCCIÓN DE LA RED.

Considerando la ubicación de los sitios de red de los átomos de titanio (fig. 1) y sabiendo que los átomos de aluminio no aportan efectos magnéticos en la estructura, se procedió a construir la red bidimensional solo de átomos de Ti que están ubicados en el plano XY a una distancia igual a  $Z = (n + \frac{1}{2})$ , con  $n$  siendo un entero, lo que nos deja una estructura como la siguiente:

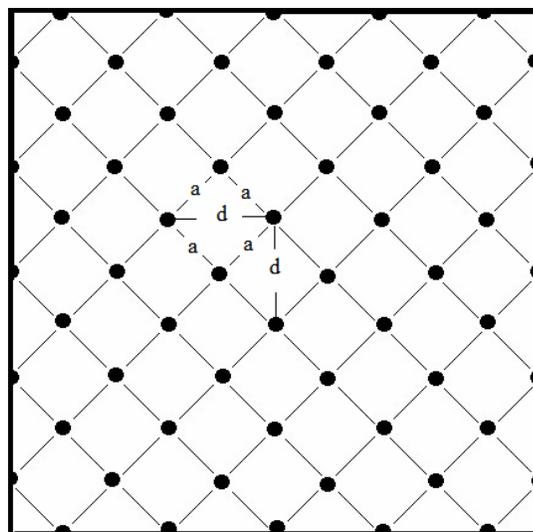


Figura 10. Representación de la red bidimensional de átomos de titanio.

La longitud de la red construida fue de  $L=50$  átomos, lo que arrojó un número total de átomos igual a:

$$N = L \times L = 50 \times 50 = 2500 \text{ átomos} \quad (69)$$

Se utilizó además para facilidades de cálculo condiciones periódicas de frontera.

Los cálculos se hicieron para  $L=40$ ,  $L=30$ ,  $L=20$  y  $L=10$ .

#### 4.3. CÁLCULO DE LA DISTANCIA ENTRE PRIMEROS VECINOS.

De acuerdo a la figura 10, la distancia entre dos átomos de Ti es:

$$d = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{2}}{2}a = 0,282 \text{ nm} \quad (70)$$

Para facilitar el estudio se hizo una rotación de  $45^\circ$  alrededor del eje z conservando intacto sus otros parámetros, lo que nos dejó la misma red de átomos de Ti pero desde un enfoque más fácil de trabajar:

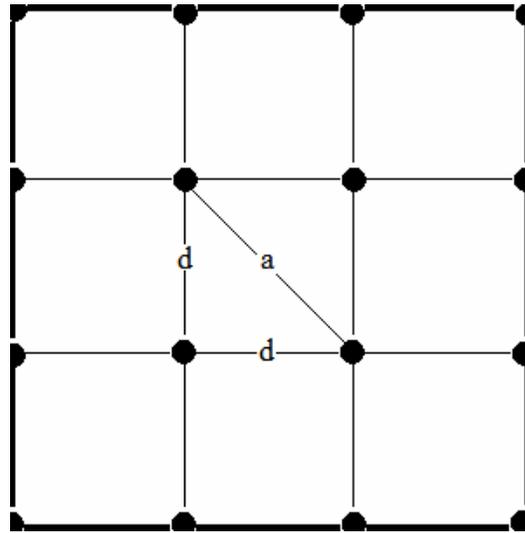


Figura 11. Red bidimensional de átomos de Ti con parámetro de red  $d=0,282$  nm.

#### 4.4. INICIALIZACIÓN DE PARAMETROS EN LA RED.

Luego de construida la red, se procedió a asignarle a cada espín un valor según los parámetros del Modelo de Ising. Este proceso consistió en un recorrido hecho por cada sitio de la red asignando el valor del espín de acuerdo con el resultado obtenido por un generador de números aleatorios. Dicho generador, que empieza con un valor entero inicial llamado semilla, realizó una serie de procedimientos matemáticos con el cual arrojó como resultado un número real de naturaleza aleatoria comprendido en el rango  $[0,1]$ . Cuando el número resultante del generador estuvo comprendido entre  $[0, (0,5)]$ , el valor del espín en el sitio de red recorrido fue 1. En el caso en que el número resultante del generador estuvo comprendido entre  $[(0,5),1]$ , el valor del espín en el sitio de red recorrido fue -1. De esta manera se estableció una configuración inicial para el arreglo de espines en la red bidimensional de átomos de titanio.

#### **4.5. TERMALIZACIÓN O AÑEJO DE LA ESTRUCTURA.**

Un paso de Monte Carlo es definido como el proceso en el cual se recorren todos los sitios de la red al azar aplicando el algoritmo de Metrópolis.

Dada la configuración inicial de la red, se procedió a aplicar 5000 pasos de Monte Carlo a la estructura antes de recolectar datos. Este proceso es la denominada termalización o añejo, la cual tiene como objetivo establecer una configuración en la red más acorde a la realidad lo que trae como consecuencia la generación de resultados de mejor calidad.

#### **4.6. MUESTREO Y CÁLCULO DE RESULTADOS.**

Primeramente se ejecutó el algoritmo de Metrópolis entre 100 K y 1000 K con el objeto de visualizar a que temperatura aparecía la transición magnética de fase, encontrándose así que para el método Hartree-Fock y LSDA la transición era significativa cerca de 640 K. Se hizo el mismo chequeo para la aproximación con el funcional híbrido B3LYP, encontrándose la transición magnética cerca de 120 K.

Mediante el uso de la ecuación (16) se realizó la simulación de la estructura para un rango de temperatura entre 500 y 800 K con un incremento de 1K para los valores de J calculados por el método Hartree-Fock y DFT con funcional tipo LSDA. Para el valor de J calculado por DFT con funcional híbrido tipo B3LYP el rango de temperatura trabajado fue entre 50 K y 250 K con un incremento de 1 K. La simulación se realizó para dos casos:

- En ausencia de campo magnético externo: en este caso se realizó la simulación considerando la no existencia de un campo magnético externo ( $H=0$ ).
- Con pequeña perturbación por parte de un campo magnético externo: en este caso se consideró una pequeña influencia de un campo externo  $H$  de magnitud 0,2 T.

Por cada temperatura se aplicaron 10000 pasos de Monte Carlo en los cuales se calcularon entre otras cosas los valores de magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico para la estructura según las ecuaciones (6), (7), (8) respectivamente.

La implementación del algoritmo de Metrópolis en el método Monte Carlo para esta simulación se hizo siguiendo los lineamientos del algoritmo, considerando al desplazamiento dado a la partícula en apéndice A como un cambio en la orientación del espín en su sitio de red. De esta manera se ejecutó de manera exitosa la simulación de la aleación AlTi.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la tabla 1 se reportan los valores de energía para los estados singlete y triplete de la simulación mediante Gaussian para la aleación AlTi. Los valores de constante de intercambio calculados para el método HF y LSDA son cercanos, a diferencia del método con el funcional B3LYP. Debido a que tanto el método HF como LSDA se basan en la aproximación hecha por Slater en donde el determinante que lleva su nombre no toma en cuenta efectos de correlación entre los electrones, estos resultados difieren del método DFT con B3LYP ya que este último en su funcional introduce efectos de correlación según el esquema de Lee, Yang y Parr así como el esquema de Vosko, Wilk y Nusair que ayudan a satisfacer un poco más la calidad del cálculo. Por lo tanto, los resultados ejecutados según el método DFT con el funcional B3LYP se consideran más confiables en relación a los restantes.

Tabla 1. Resultados de energías de estados singlete, triplete y constante de intercambio para la aleación AlTi.

Método	$E_{\uparrow\downarrow}$ (eV)	$E_{\uparrow\uparrow}$ (eV)	J (meV)
HF	-156420,22	-156421,87	275,56
DFT (LSDA)	-156272,58	-156274,22	274,01
DFT (B3LYP)	-156663,51	-156663,83	54,17

En la figura 12 se muestra como varía la energía total en función de la temperatura, presentando una variación significativa de la energía alrededor de

$T=636$  K. A medida que la temperatura aumenta también lo hace la energía total en la cual se puede ver que hay un aumento brusco de su valor alrededor de  $T=636$  K. Alrededor esta temperatura ocurre la transición magnética.

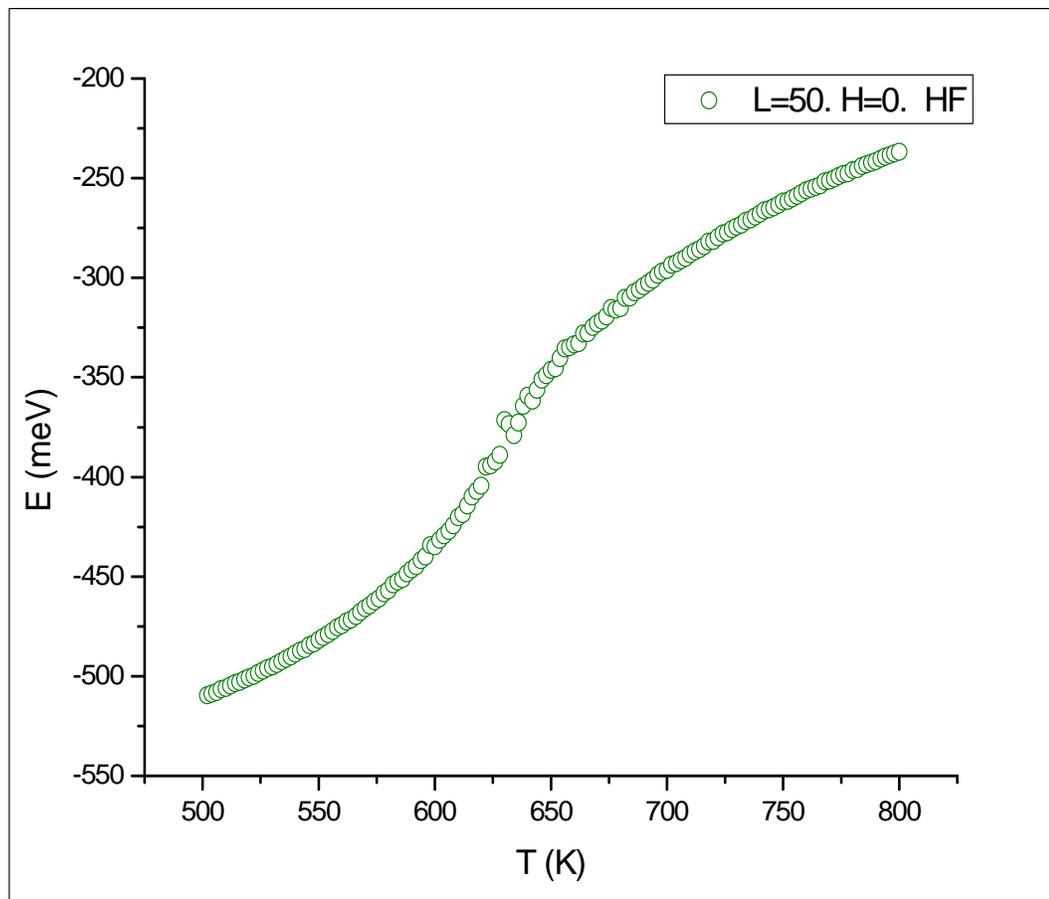


Figura 12. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 13 observa como varía la magnetización por espín la cual disminuye a medida que la temperatura aumenta. Es fácil ver que a medida que la temperatura se eleva, la magnetización por espín va disminuyendo lanzando como tendencia una curva suave con un punto de inflexión en  $T= 636$  K, ésta es la denominada temperatura de Curie, en la denominada transición magnética de fase

de 1er orden, según el modelo de Ising. En este punto se produce la transición magnética de una fase ordenada en los espines a una fase desordenada en la cual estos últimos van perdiendo su magnetización, con lo que sus orientaciones se van tomando al azar pasando la estructura de una fase ferromagnética a una fase paramagnética.

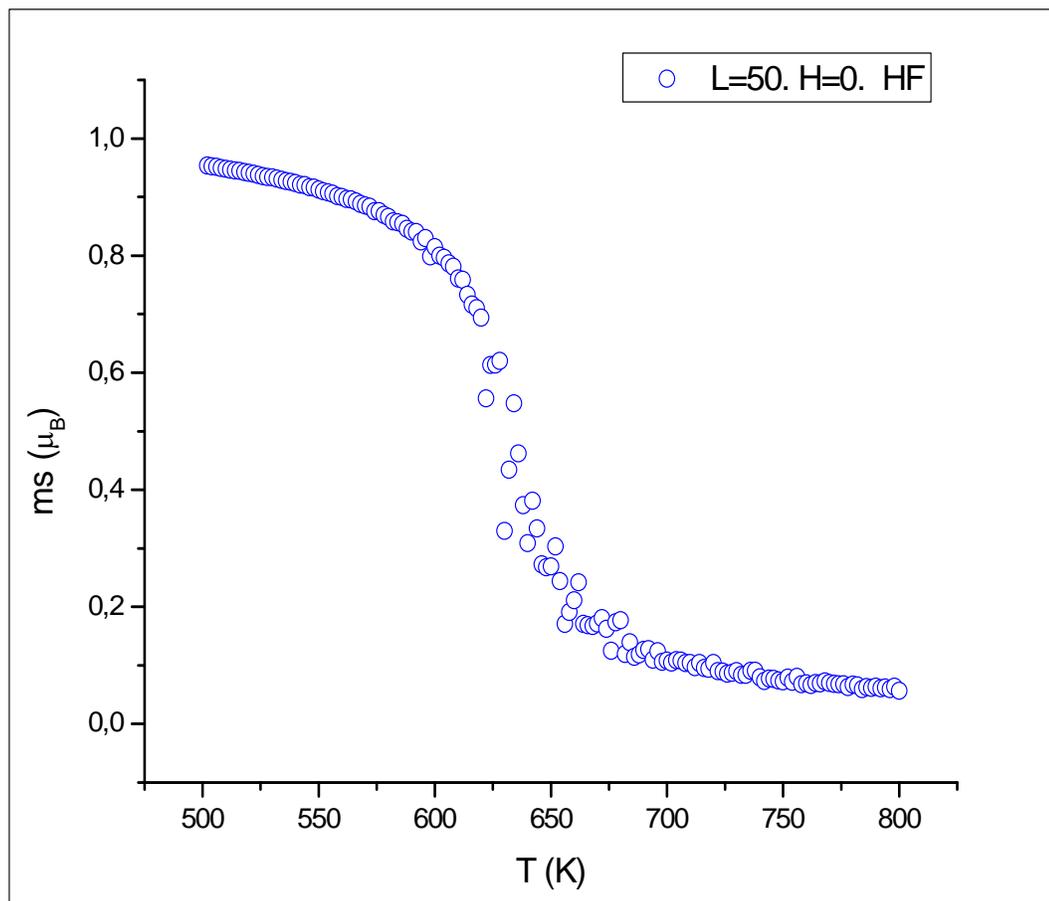


Figura 13. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 14 se observa un incremento de la susceptibilidad magnética con un pico en  $T=636$  K. Este valor pico se traduce en el hecho de que cada espín que conforma la estructura va siendo más susceptible a sufrir cambios en su orientación

con lo que al incrementar un poco su energía interna por medio del aumento de temperatura, esta última es suficiente como para superar las interacciones espín-espín que lo mantienen ordenado, trayendo como consecuencia una fase de espines desordenada en la temperatura de Curie. Se observa también unos picos en  $T=622$  K y  $T=630$  K.

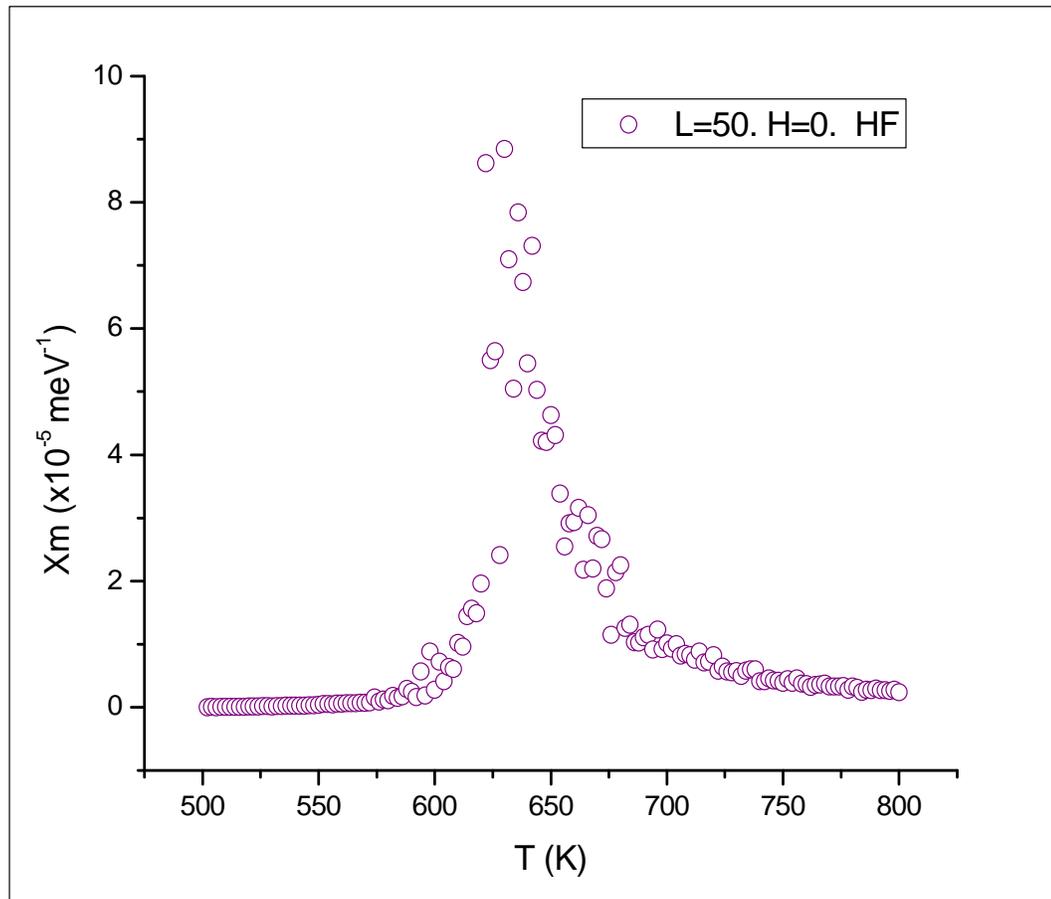


Figura 14. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 15 se observa el aumento del calor específico a medida que la temperatura aumenta presentando un pico a  $T=636$  K que es la temperatura de Curie propia de la transición de fase de 2do orden, según el modelo de Ising. A medida que la temperatura se eleva en la fase ferromagnética hasta llegar a su temperatura

de Curie, la energía interna absorbida por los espines es mayor y se hace máxima en  $T=636$  K debido a que los espines deben absorber una gran cantidad de energía para poder romper su alineamiento y crear una fase desordenada. Se observa además un pico en  $T=622$  K. Este pico podría atribuirse a cambios estructurales que sufre la aleación ya que a medida que aumenta la temperatura en un material este va cambiando su estructura.

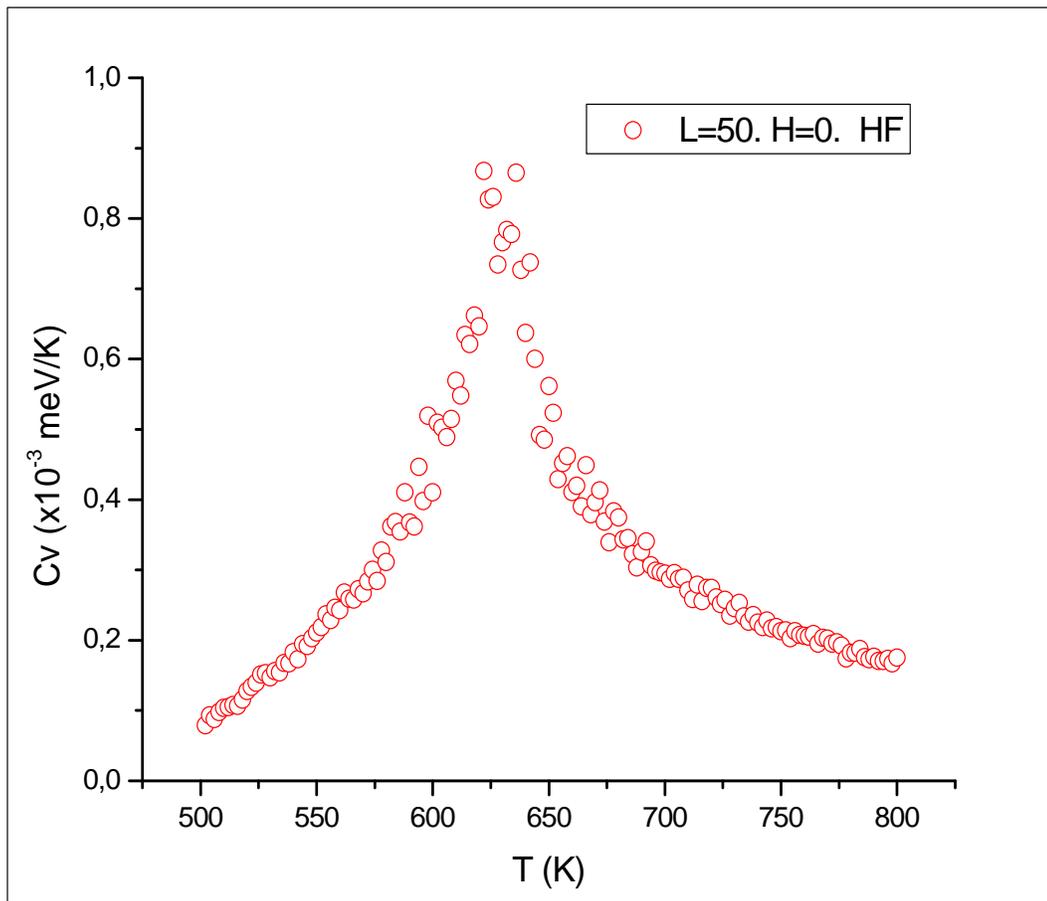


Figura 15. Comportamiento del calor específico de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 16 se puede observar que a medida que la temperatura aumenta también lo va haciendo la energía de la aleación. Para todas las curvas de energía se puede decir que existe el mismo comportamiento. Además, se puede ver una

variación significativa de la energía en todas las curvas en las temperaturas cercanas a  $T=636$  K. Se puede decir además que el tamaño de la red no influye en la energía total puesto que para cualquier valor de  $L$  el comportamiento de la misma se mantiene invariante.

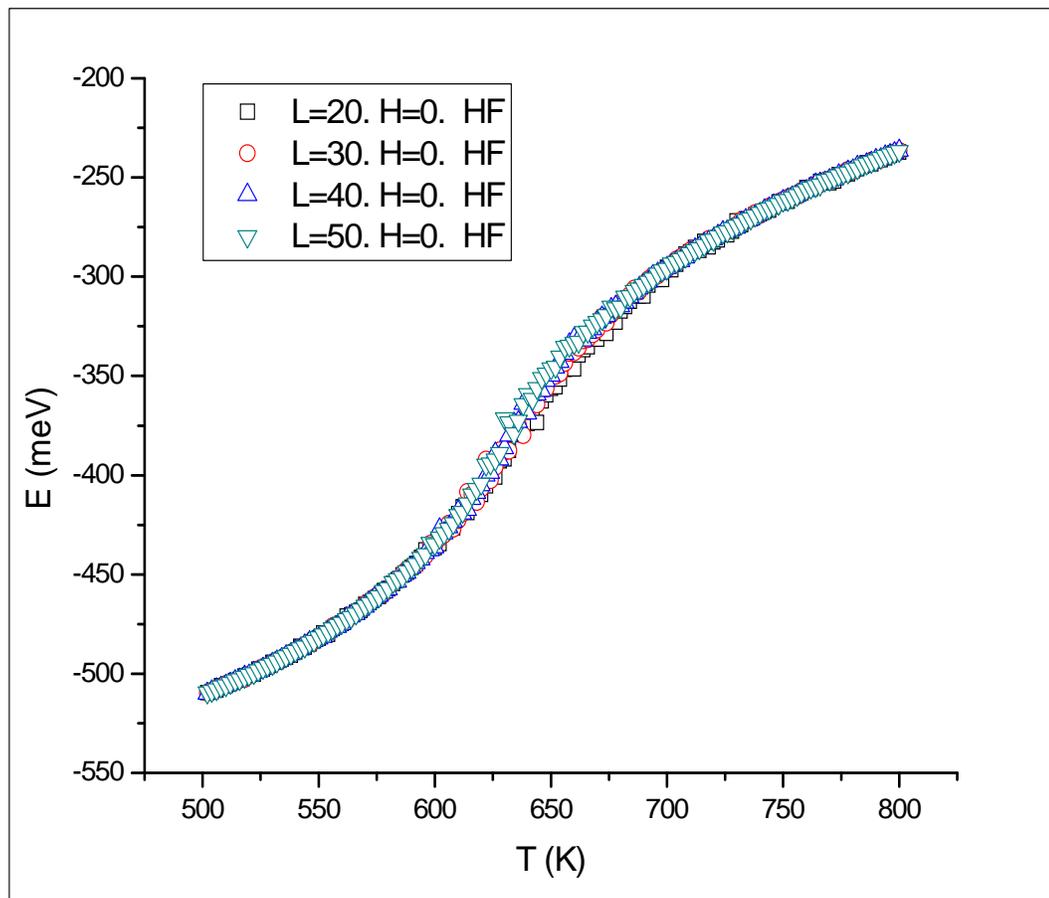


Figura 16. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 17 se observa que a medida que el número de celdas que se introduce en la simulación por Monte Carlo es más grande, es más fácil hallar el punto de inflexión de la curva que según el modelo nos arrojará un valor más

preciso de la temperatura de transición lo cual se evidencia en la gráfica. Esto se debe a que a medida que el número de celdas consideradas para la estructura se incrementa, también lo hará el número de espines que conforman los sitios de la red que a su vez es un factor determinante en el cálculo de la magnetización por espín. Los valores de  $L$  para los cuales se observa mejor concordancia en los resultados corresponden a  $L=40$  y  $L=50$  puesto que la convergencia no es alcanzada en este caso.

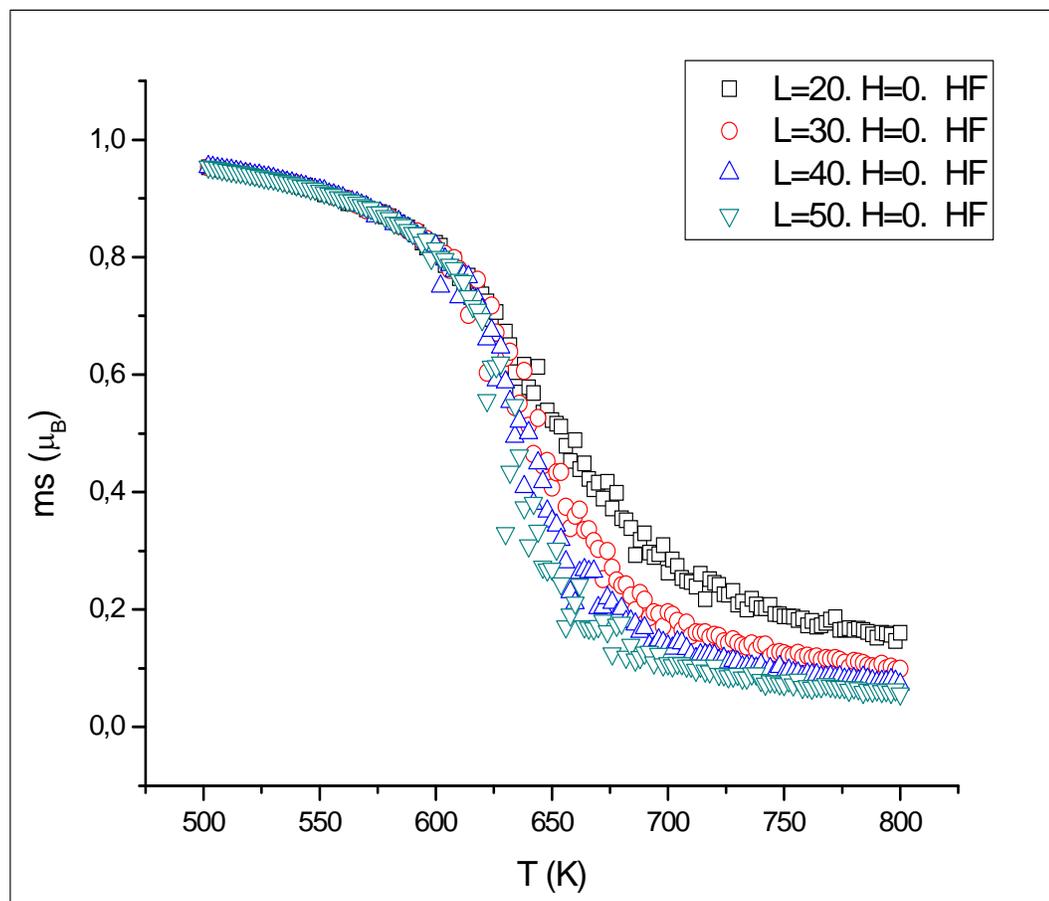


Figura 17. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 18 se puede apreciar cómo se comporta la susceptibilidad magnética para distintos valores de longitud de celda en la simulación por Monte Carlo. Mientras  $L$  es más grande, la curva de susceptibilidad magnética se va tornando más estrecha. Los valores de  $L$  para los cuales se observa mejor concordancia en los resultados corresponden a  $L=40$  y  $L=50$ , en donde la temperatura de transición se aproxima a  $T=635$  K y se observan además picos en  $T=622$  K y  $T=630$  K por lo que se puede decir que hay una dependencia entre los resultados y el tamaño de la red.

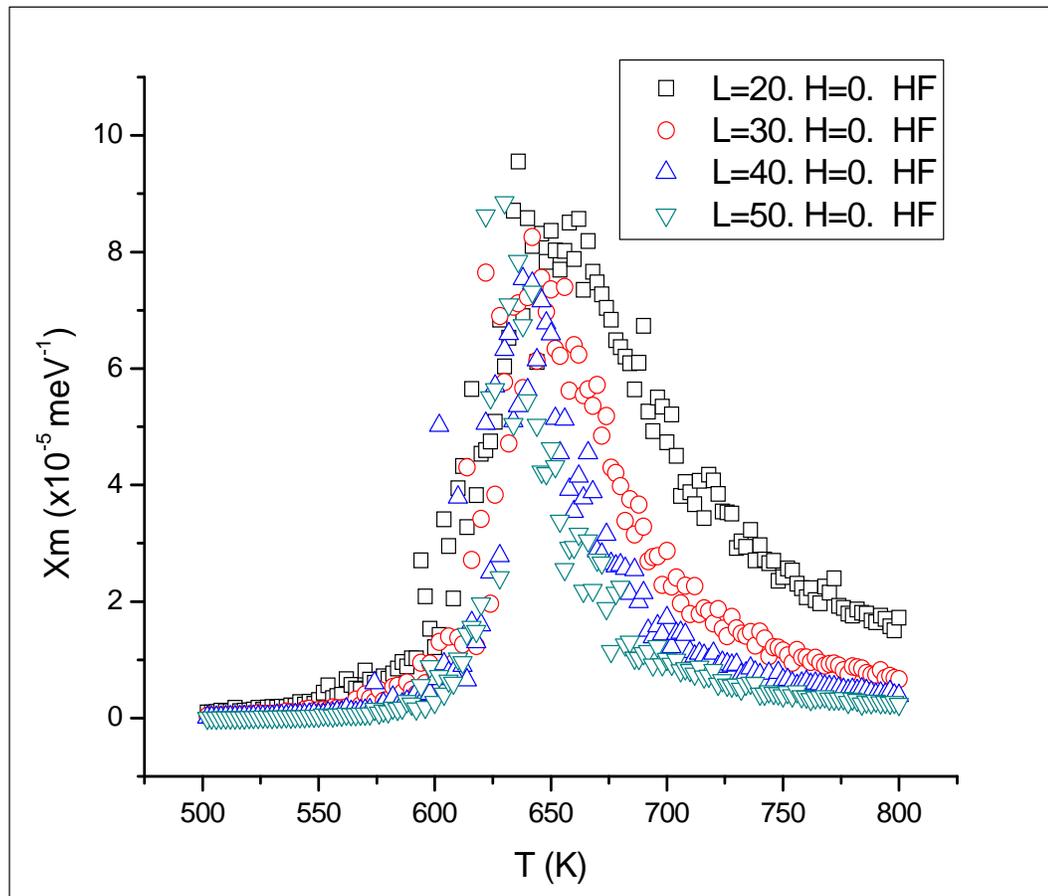


Figura 18. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 19 se observa que a medida que  $L$  aumenta los valores de calor

específico para la temperatura de transición  $T=636$  K son más pequeños. Además se observan comportamientos irregulares con picos alrededor de  $T=612$  K,  $T=622$  K y  $T=630$  K para cualquier valor de  $L$  los cuales podrían atribuirse a cambios estructurales que sufre la aleación. Se puede decir además que para  $L=40$  y  $L=50$  los valores de calor específico son relativamente cercanos en comparación con las otras curvas.

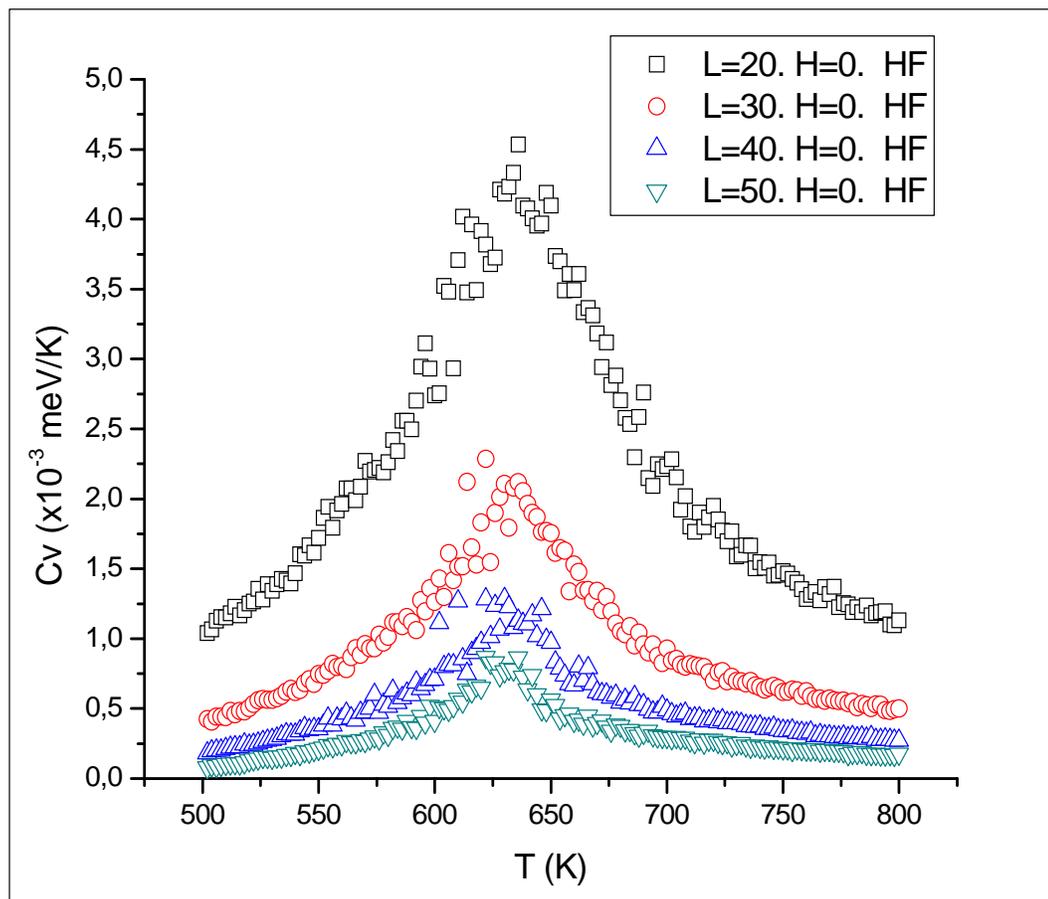


Figura 19. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 20 se observa un aumento en la energía total a medida que aumenta la temperatura con un comportamiento irregular de la energía alrededor de  $T=640$  K. Es evidente que este comportamiento se debe a que la aleación empieza a sufrir

cambios en su energía por efecto del cambio en la orientación de los espines que la conforman, lo que da como resultado que la energía varíe mucho más.

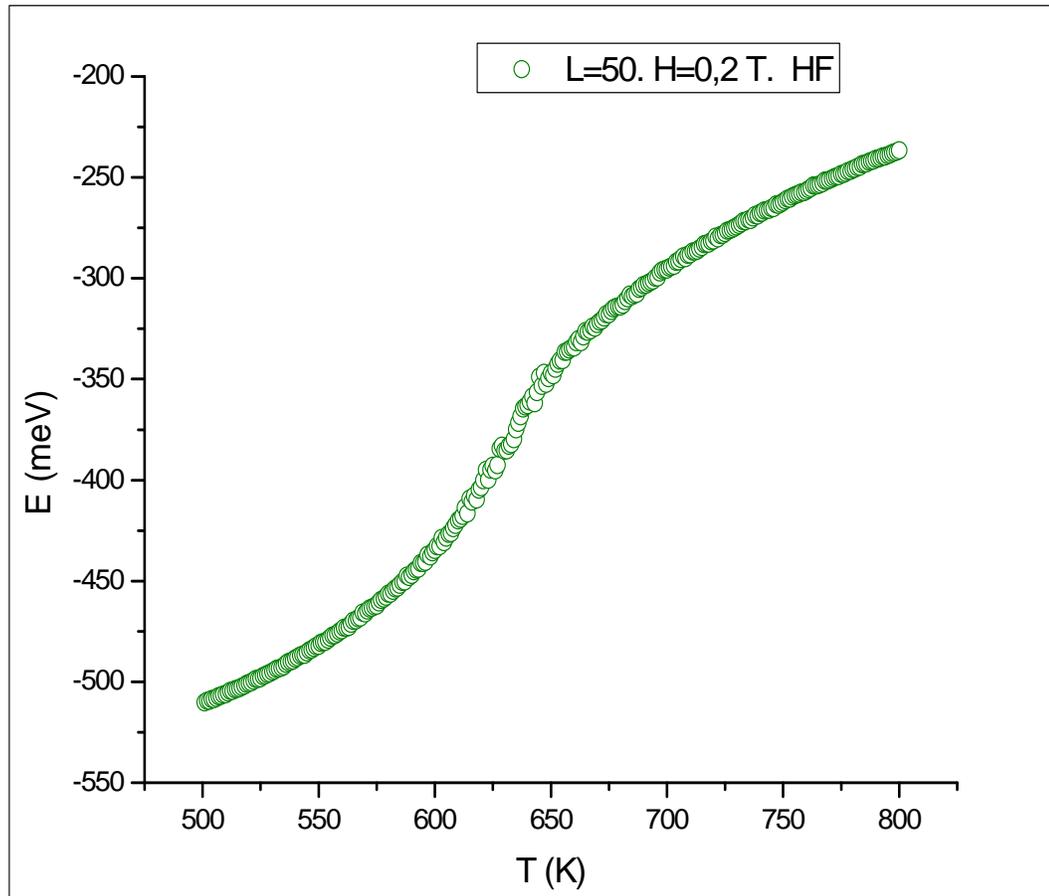


Figura 20. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en campo externo de 0,2 T de magnitud con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 21 se observa el caso donde existe la acción de un campo magnético externo sobre el material. Los valores reportados para el punto de inflexión en este caso fueron de  $T=642$  K, mayor al valor reportado para el caso de la ausencia de dicho campo (fig. 13). Esto se debe a que al existir una interacción adicional en el material, los espines necesitan un poco más de energía para romper dicho alineamiento, la cual es proporcionada por medio de la temperatura. Es por

ello, que los espines necesitan una temperatura más elevada la cual les proporciona más energía para pasar de una fase ferromagnética a una fase paramagnética como se observa en la gráfica.

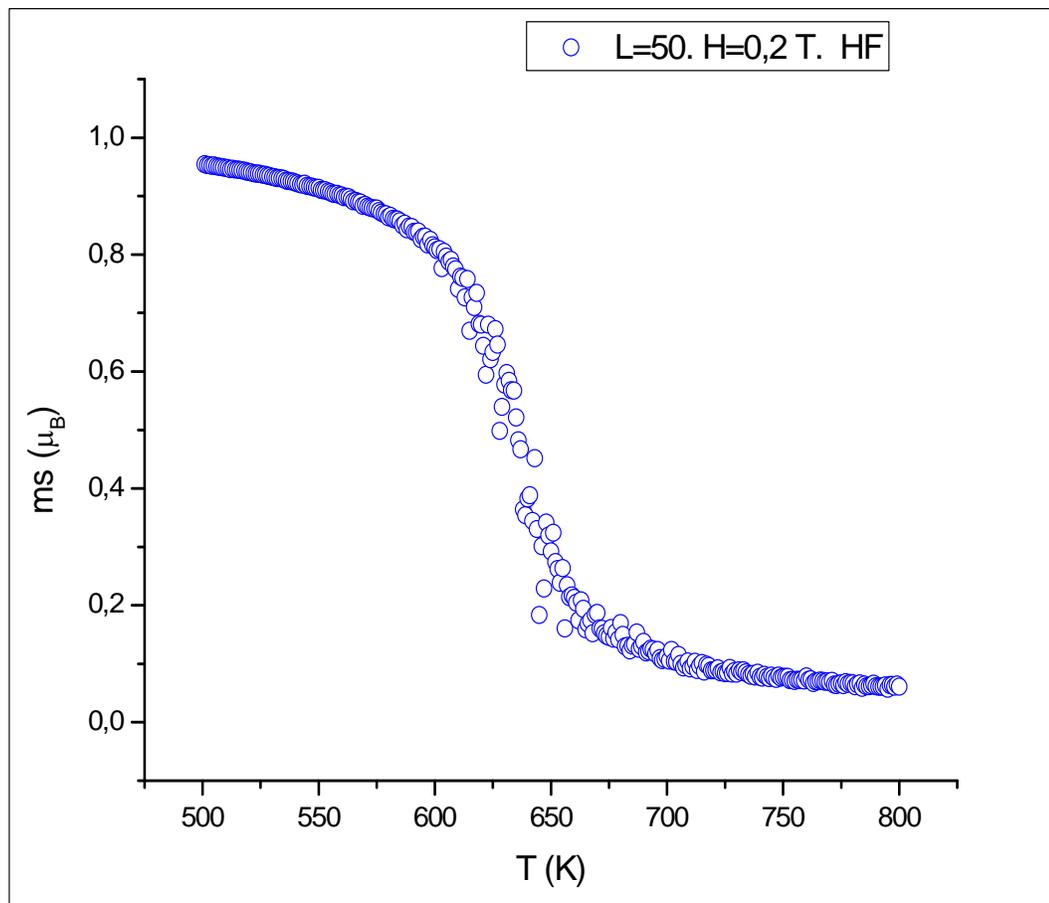


Figura 21. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo externo de 0,2 T de magnitud con distintos valores de longitud de celda utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 22 se observa que a medida que la temperatura se eleva la susceptibilidad magnética aumenta hasta un pico en  $T=642 K$  y luego va descendiendo. Este valor pico en la susceptibilidad es más elevado en comparación con lo reportado para el caso en la ausencia de campo magnético externo (fig. 14). Se

observan además picos en la susceptibilidad en  $T=603$  K,  $T=605$  K,  $T=610$  K,  $T=622$  K y  $T=628$  K.

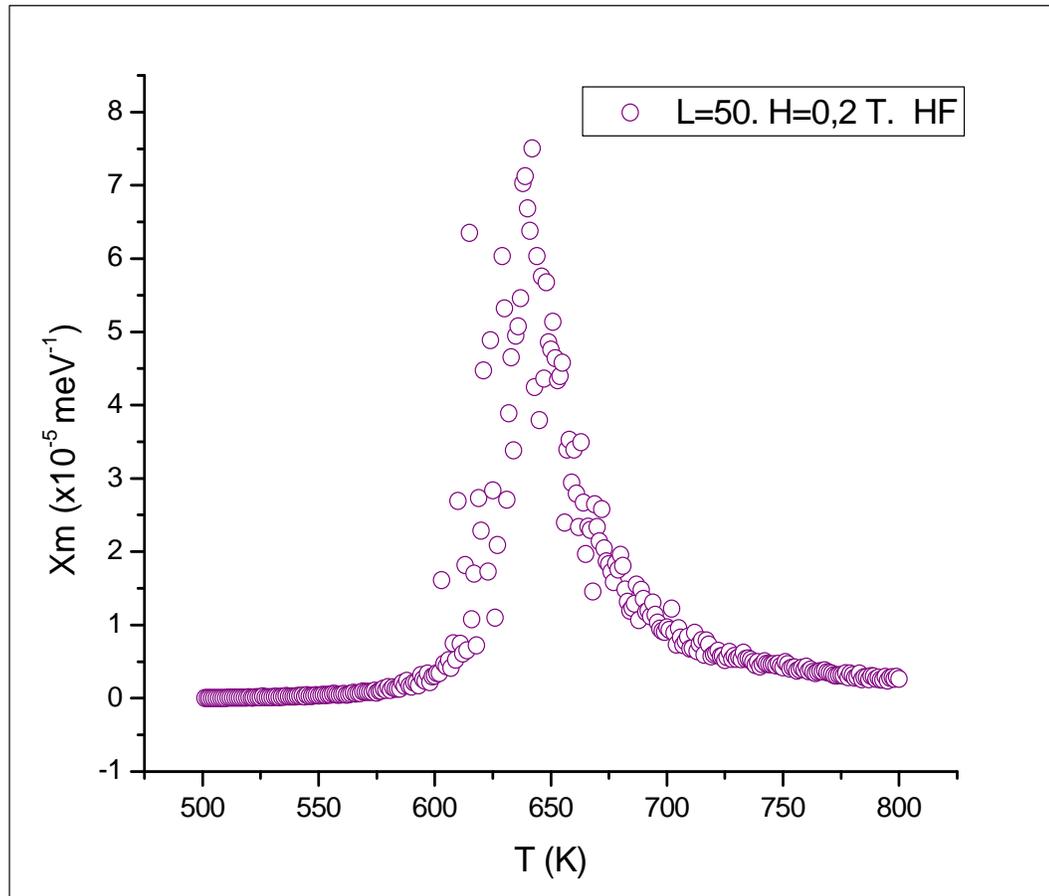


Figura 22. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo externo de 0,2 T de magnitud para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando la aproximación Hartree-Fock.

Se puede observar en la figura 23 al calor específico con valores máximos en  $T=603$  K,  $T=615$  K,  $T=622$  K y  $T=628$  K interpretados como cambios estructurales en la aleación puesto que su comportamiento coincide con los picos estructurales reportados en las figuras 21 y 22. La temperatura  $T=642$  K, a pesar de esperar verla como el valor máximo en la gráfica para corroborarla como la temperatura de

transición en concordancia con las figuras 21 y 22, sería así si se despreciaran los picos atribuidos a transiciones estructurales en las temperaturas antes mencionadas.

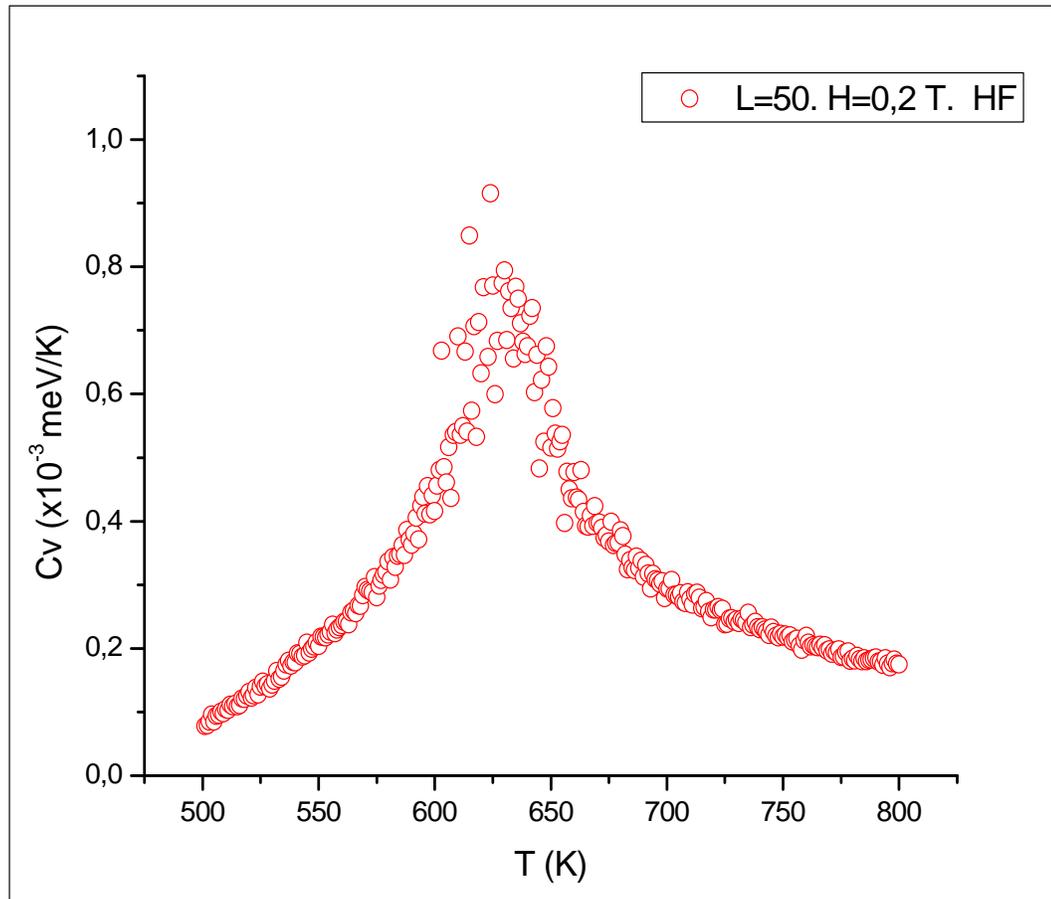


Figura 23. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo externo de 0,2 T de magnitud para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando la aproximación Hartree-Fock.

En la figura 24 se observa un aumento en la energía total a medida que aumenta la temperatura con un comportamiento irregular de la misma alrededor de  $T=630$  K. En este punto la aleación empieza a sufrir cambios a nivel de los espines lo cual da como resultado un aumento rápido de su energía en comparación con los primeros cambios de temperatura.

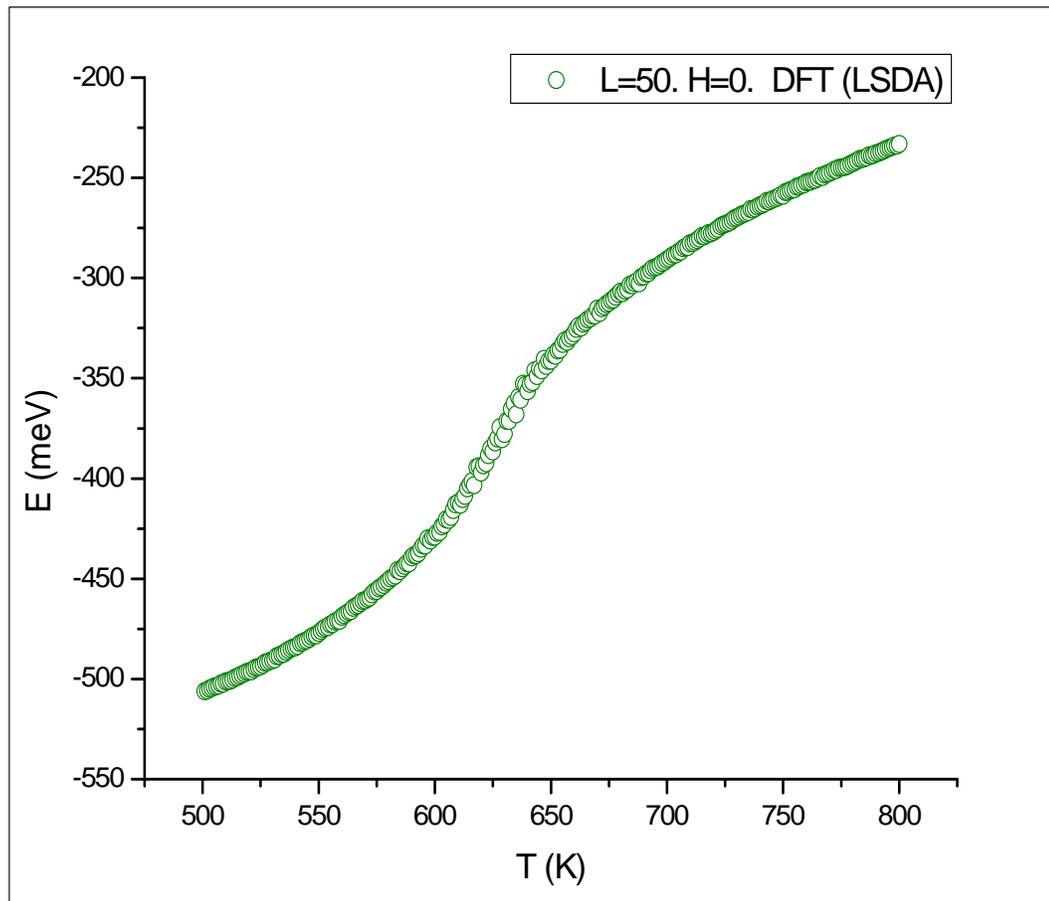


Figura 24. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando el método LSDA.

En la figura 25 se presenta una curva de magnetización por espín en función de la temperatura en la cual su punto de inflexión se encuentra a  $T=631$  K. En este punto, la estructura cambia el orden de sus espines pasando la misma de una fase ferromagnética a una fase paramagnética siendo su punto de inflexión la temperatura de transición magnética.

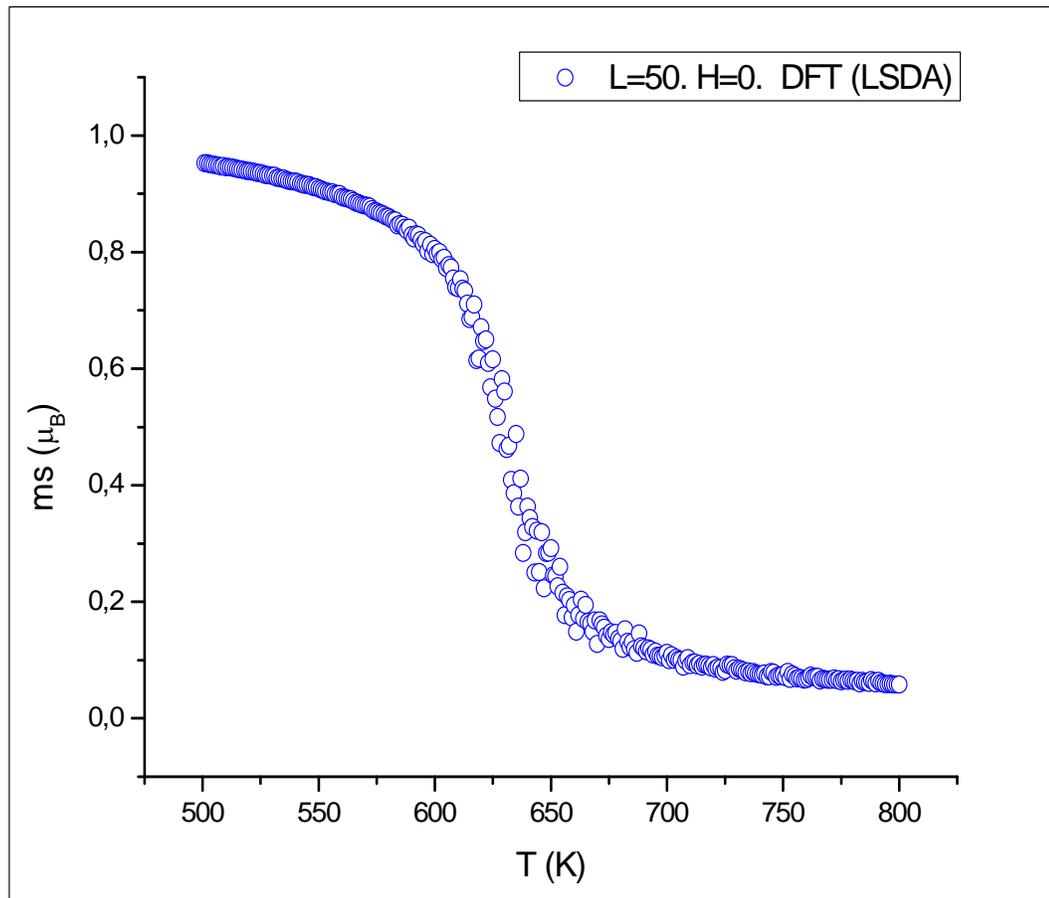


Figura 25. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando el método LSDA.

En la figura 26 se muestra la variación de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura la cual presenta su valor máximo en  $T=631$  K en concordancia con lo reportado en la figura 25, por lo que ésta temperatura correspondería entonces a la temperatura de transición magnética. Por encima de esta temperatura, la susceptibilidad magnética disminuye rápidamente hasta llegar a cero. Se pueden apreciar además picos en  $T=615$  K,  $T=618$  K y  $T=624$  K.

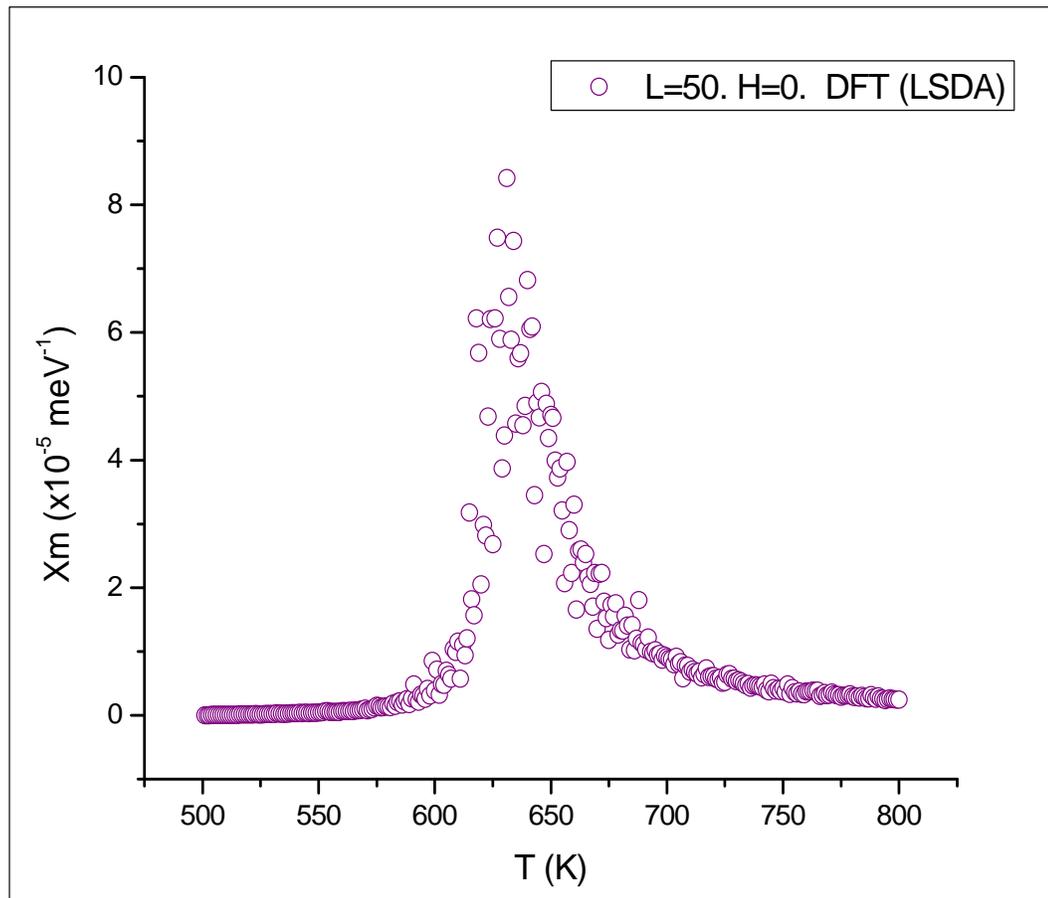


Figura 26. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando el método LSDA.

En la figura 27 se observa al aumento del calor específico a medida que lo hace la temperatura con su valor máximo en  $T=631$  K en concordancia con las temperaturas de transición magnética reportadas en las figuras 25 y 26. Por encima de esta temperatura se puede ver que el calor específico disminuye gradualmente mientras aumenta la temperatura. Se observan además picos de transiciones estructurales en  $T=615$ ,  $T=618$  K y  $T=624$  K en concordancia con los picos reportados en la figura 26.

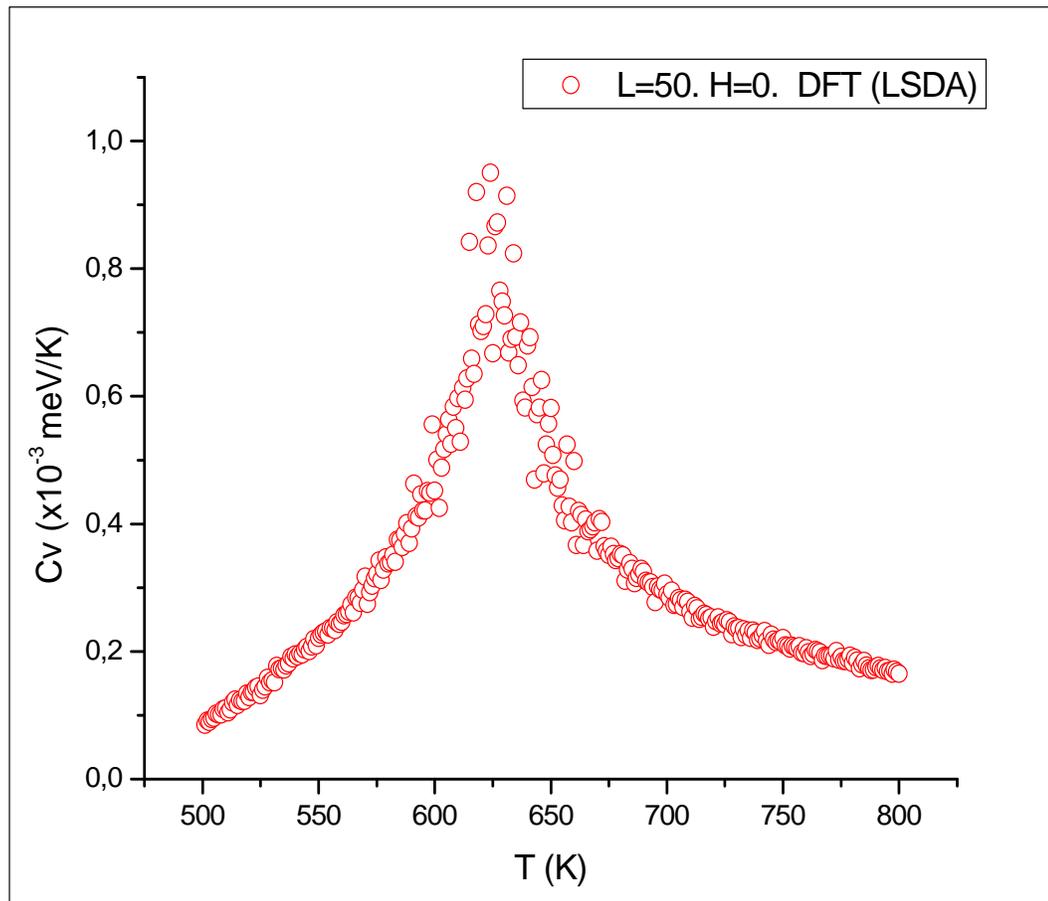


Figura 27. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando el método LSDA.

En la figura 28 se muestra a la energía total en función de la temperatura. Se puede ver un aumento de la energía de la aleación a medida que se eleva la temperatura sin importar el valor de la longitud de celda  $L$ . Para todos los casos la variación las curvas de energía total de la aleación son cercanamente iguales lo que indica que la energía total es independiente del tamaño de la red, resultado que concuerda con lo reportado en la figura 16.

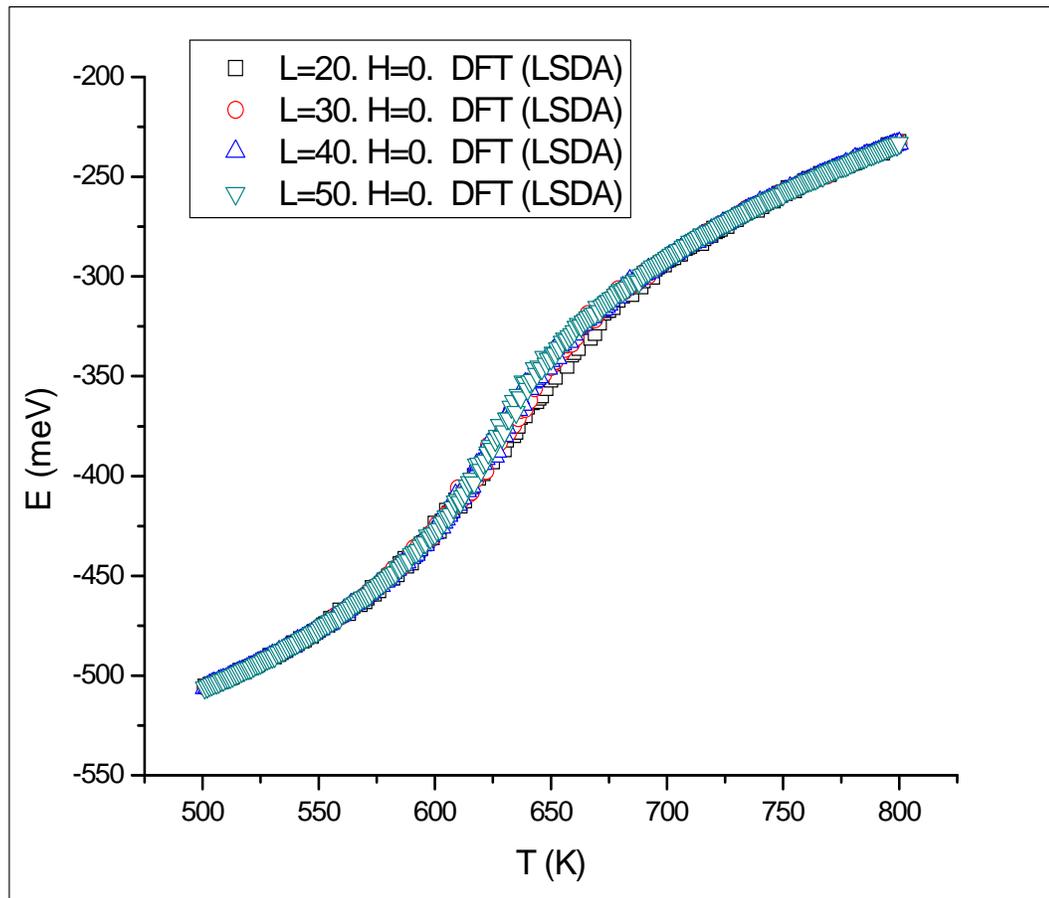


Figura 28. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo con distintos valores de longitud de celda utilizando el método LSDA.

En la figura 29 se observa el descenso de la magnetización por espín a medida que la temperatura se eleva. Se evidencia una dependencia de la magnetización por espín en función del tamaño de la red, exhibiéndose además que para cuando la longitud de celda es mayor o igual a 40, los valores de la temperatura de transición magnética son más coincidentes reportándose para este caso en  $T=631$  K. Este comportamiento de la longitud de celda coincide con lo reportado en la figura 17.

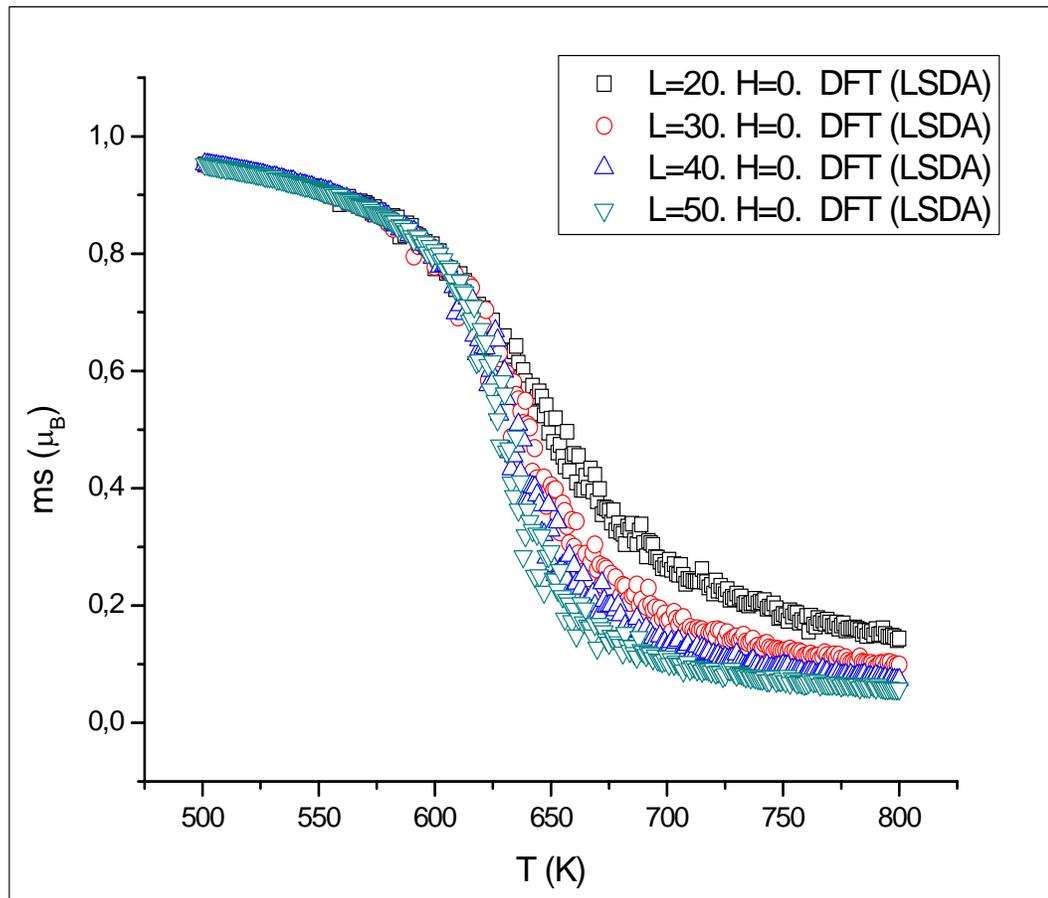


Figura 29. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando el método LSDA.

En la figura 30 se observa como varía la susceptibilidad magnética a medida que aumenta el tamaño de la red. Las curvas de susceptibilidad magnética son más estrechas a medida que el tamaño de la red aumenta, lo cual coincide con lo reportado en la figura 18. Además, los valores máximos de susceptibilidad magnética son más coincidentes para cuando  $L$  es 40 y 50 en donde se reporta su temperatura de transición magnética en  $T=631$  K.

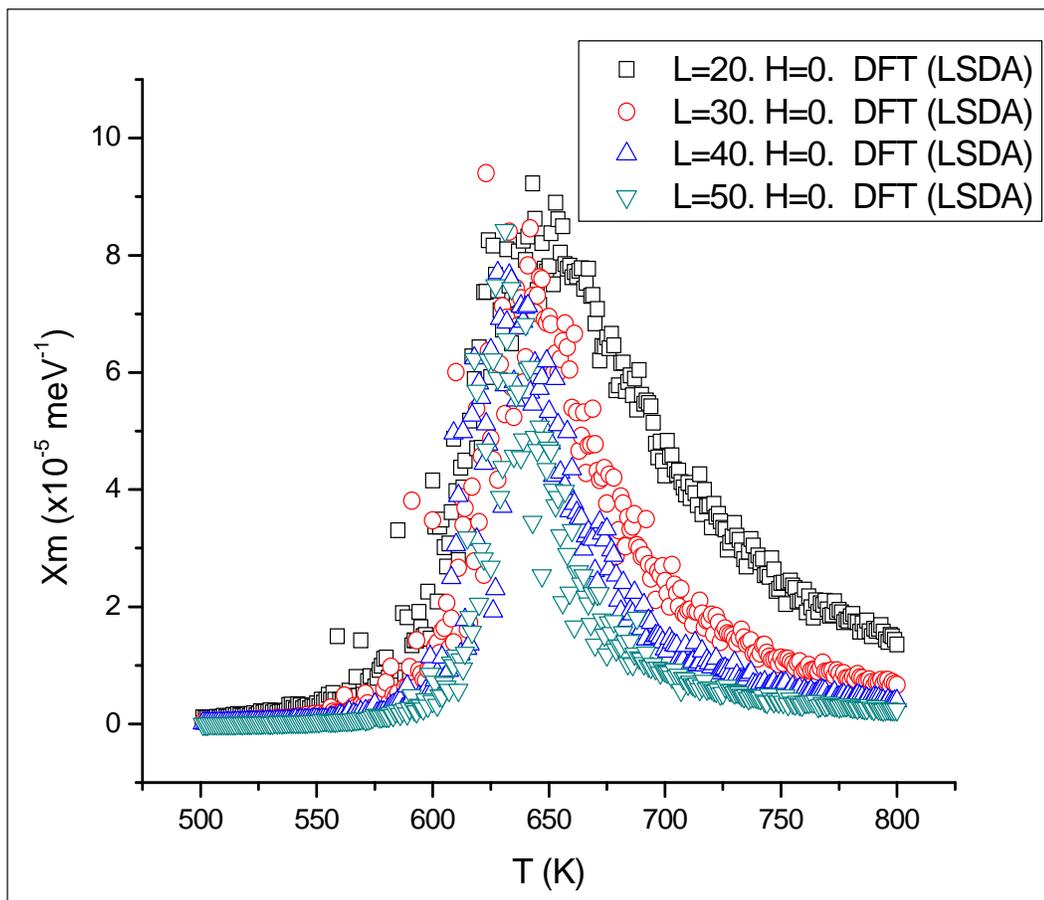


Figura 30. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando el método LSDA.

En la figura 31 se muestra el comportamiento del calor específico mientras la temperatura de la aleación se eleva, para distintos tamaños de red. Se puede apreciar que mientras el tamaño de la red aumenta, las curvas de calor específico se van haciendo más estrechas, siendo las más coincidentes aquellas que corresponden a  $L=40$  y  $L=50$ , en donde la temperatura de transición magnética se reportan cercana a  $T=631$  K. Además, se observan picos de transición estructural en casi todas las curvas para  $T=618$  K y  $T=624$  K.

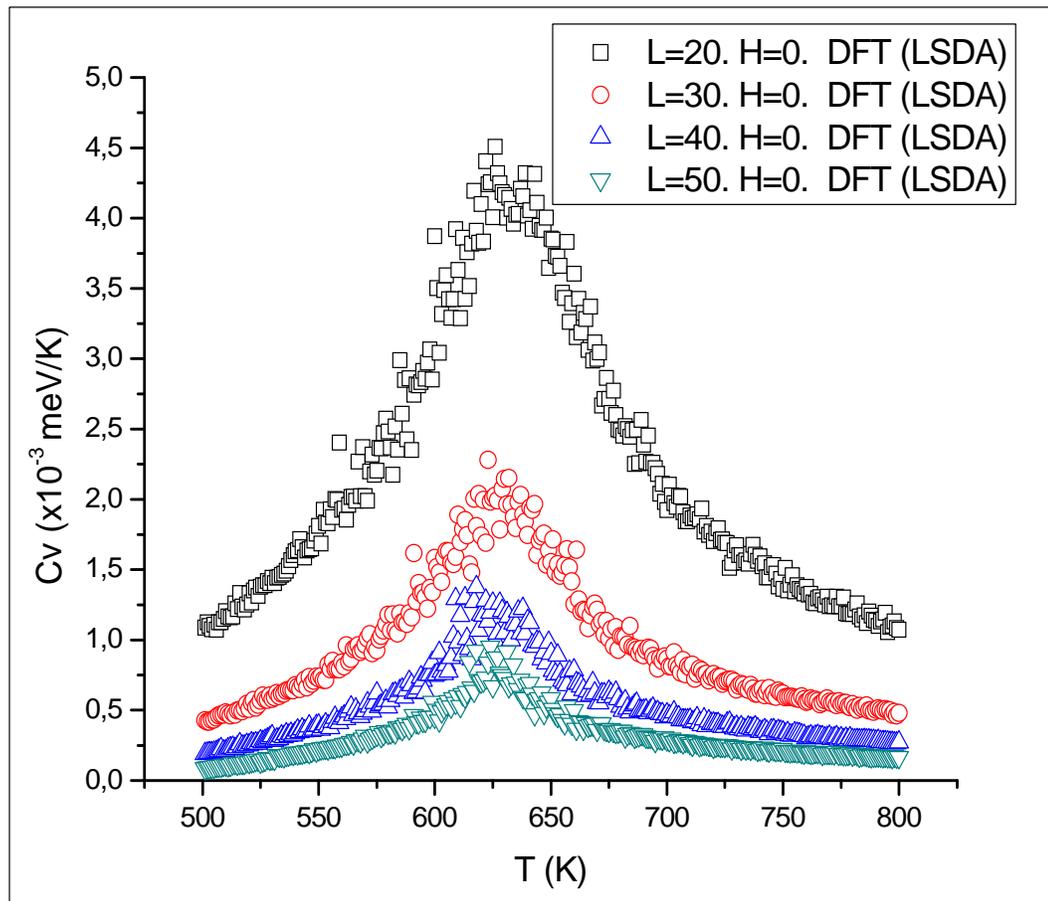


Figura 31. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando el método LSDA.

En la figura 32 se presenta el comportamiento de la energía total en función de la temperatura. Se puede apreciar aquí que a medida que la temperatura de la aleación se eleva, también lo hace su energía total, visualizándose un cambio brusco alrededor de  $T=635$  K. Alrededor de esta temperatura se produce la transición magnética en donde los espines van variando sus orientaciones.

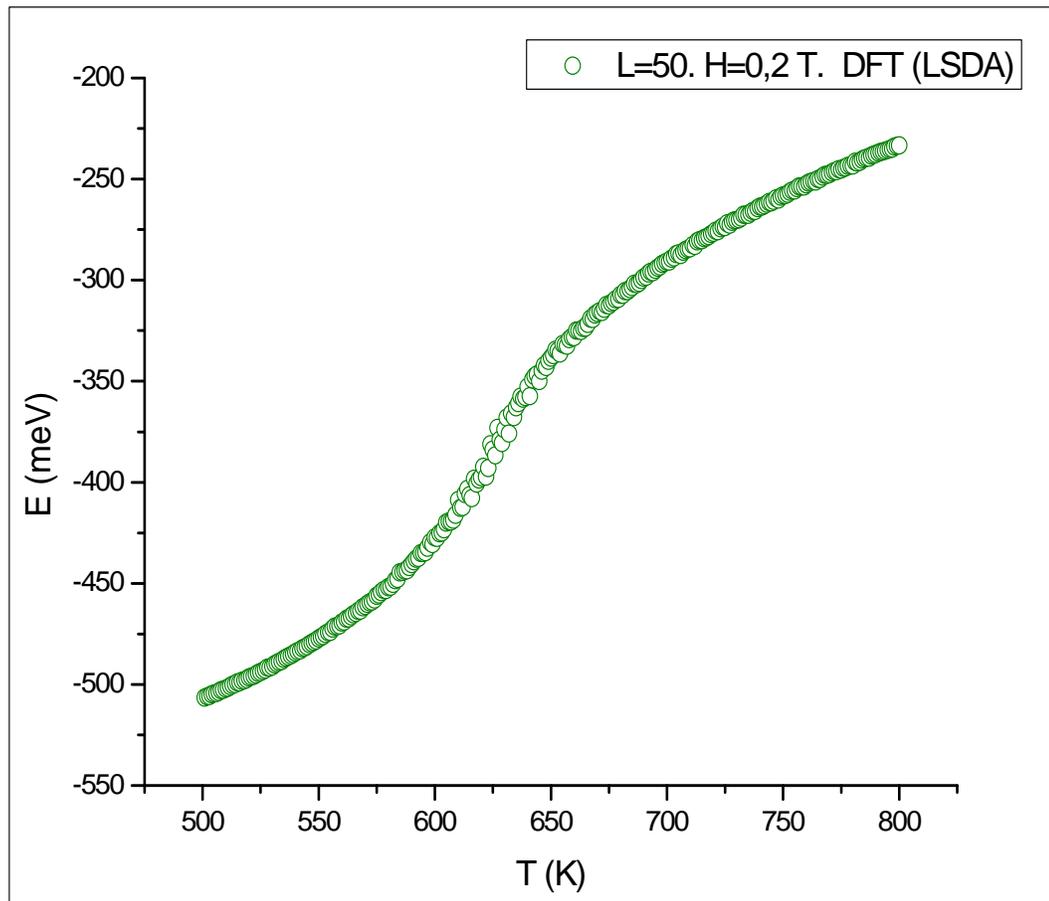


Figura 32. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando el método LSDA.

En la figura 33 se muestra la disminución de la magnetización por espín a medida que la temperatura aumenta. Se puede ver en la gráfica que su punto de inflexión se encuentra en  $T=639$  K, pasando así la aleación por una transición magnética de una fase ferromagnética a una fase paramagnética, representado así su punto de inflexión como su temperatura de transición magnética.

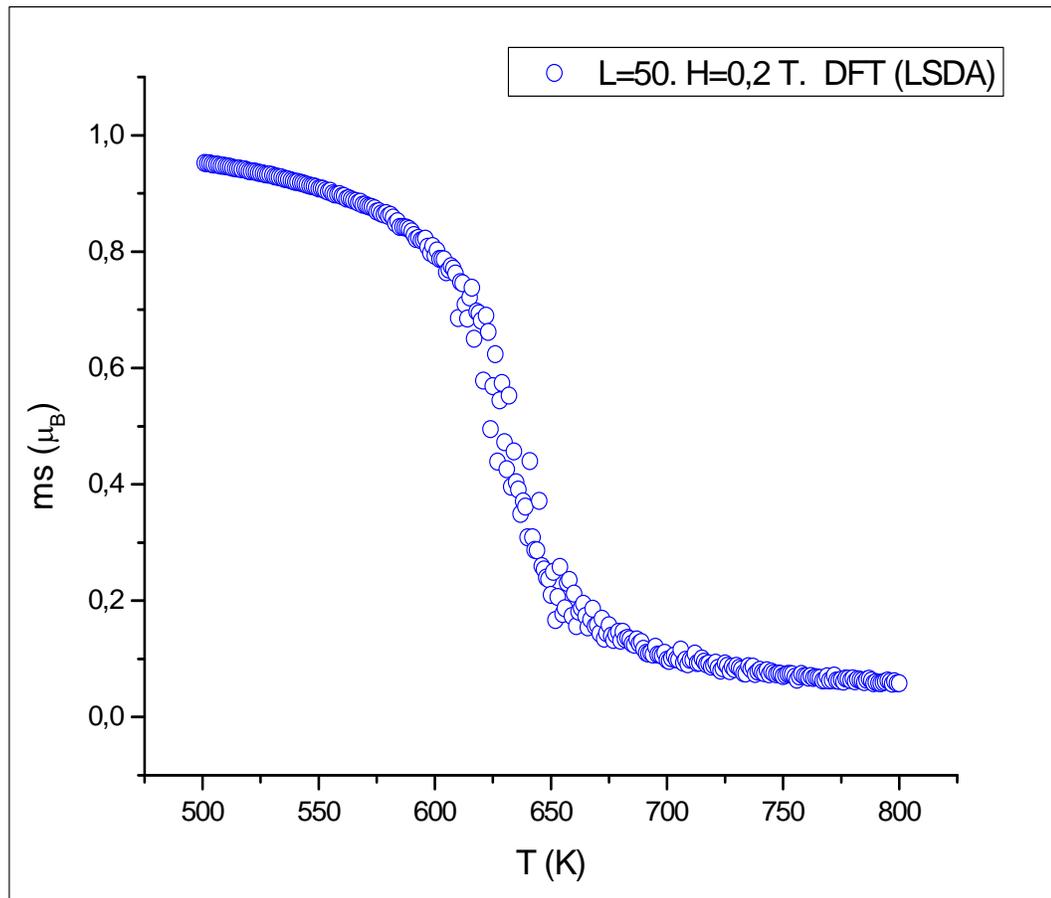


Figura 33. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando el método LSDA.

En la figura 34 se presenta como varía la susceptibilidad magnética a medida que se eleva la temperatura. Se puede ver que la susceptibilidad magnética aumenta hasta llegar a un valor pico en  $T=639$  K. Este último valor corresponde a la transición magnética en la aleación, resultado que concuerda con lo reportado en la figura 38. Por arriba de esta temperatura, la susceptibilidad magnética va disminuyendo hasta llegar a cero. Se evidencia además que existen en la figura valores picos en  $T=610$  K,  $T=624$  K y  $T=630$  K.

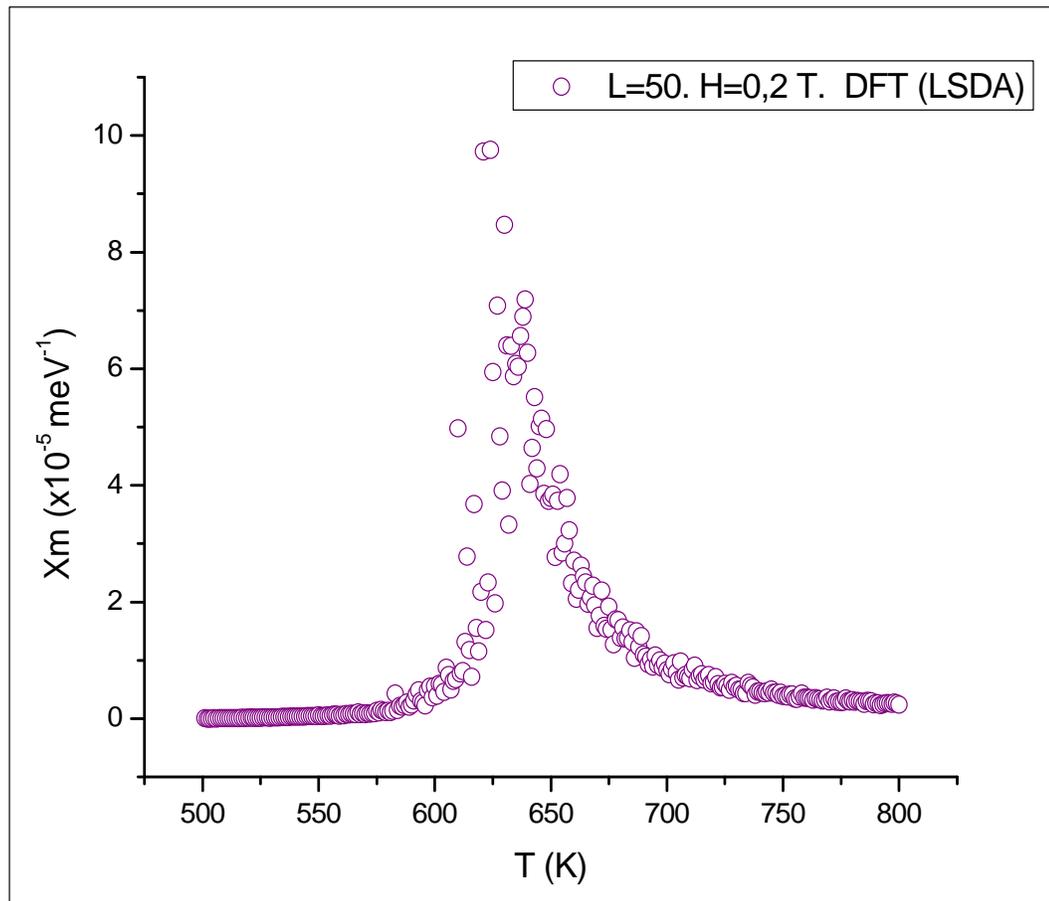


Figura 34. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando el método LSDA.

En la figura 35 se puede apreciar al calor específico presentando un aumento a medida que se eleva su temperatura hasta llegar a un valor pico en  $T=639 K$  el cual se interpreta como el punto de transición magnética que concuerda con lo reportado en la figura 33. Por arriba de esta temperatura, el calor específico va disminuyendo gradualmente. Se observa además en el calor específico que existen valores picos en  $T=610$ ,  $T=624$  y  $T=630 K$  que podrían atribuirse como picos de transición estructural los cuales concuerdan con lo reportado en la figura 34.

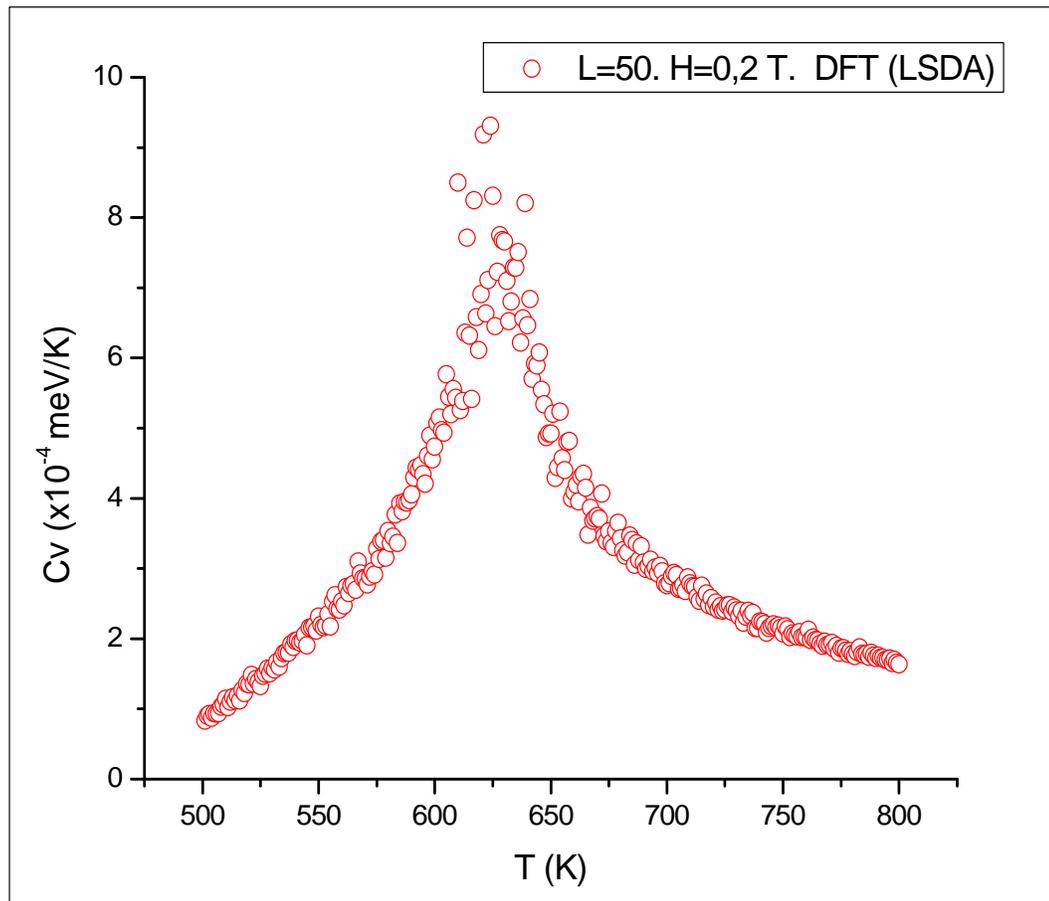


Figura 35. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando el método LSDA.

En la figura 36 se presenta al aumento de la energía total de la aleación a medida que su temperatura se eleva. Se puede observar una variación significativa de la energía alrededor de  $T=125$  K. A esta temperatura la aleación empieza sufrir cambios a nivel de los espines presentándose entonces la transición magnética donde sus orientaciones se van tornando al azar.

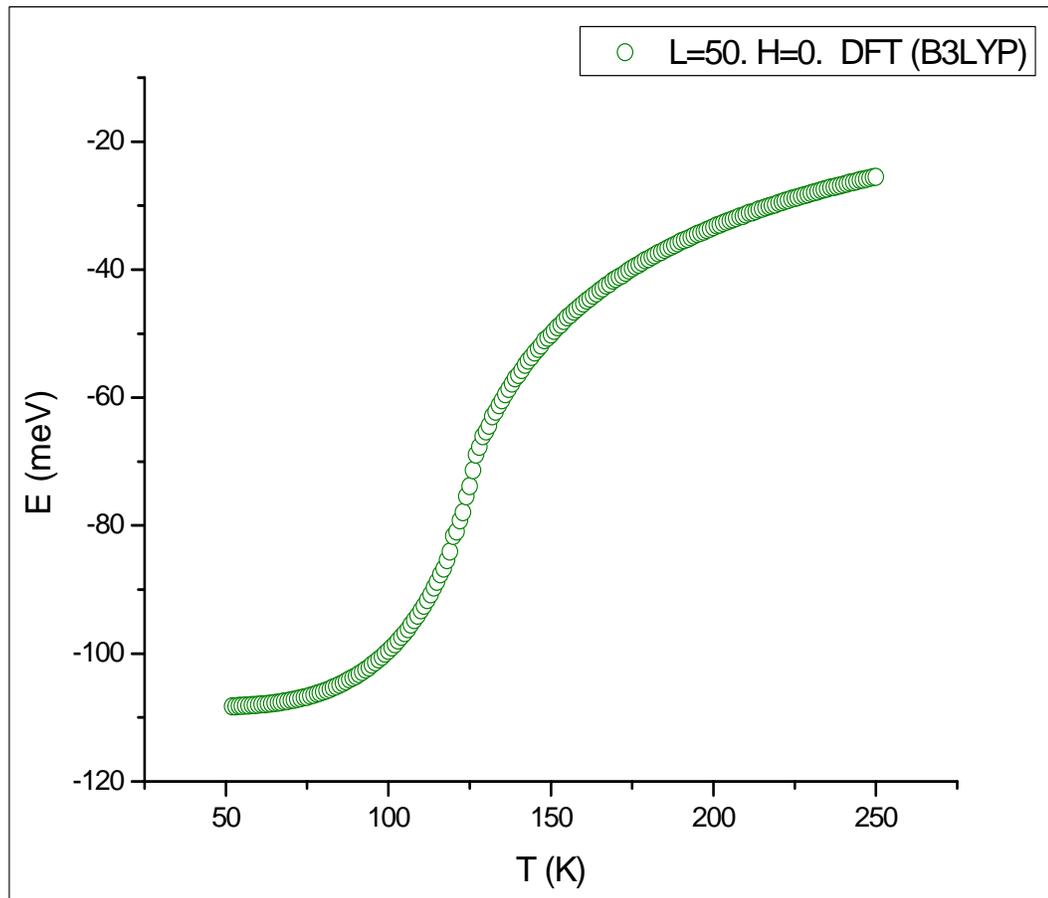


Figura 36. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 37 se observa la disminución de la magnetización por espín a medida que aumenta la temperatura. Se evidencia en la figura un rápido descenso en la magnetización por espín presentando un punto de inflexión en la curva a  $T=124$  K, el cual se interpreta como la temperatura de transición magnética donde la aleación pasa de una fase ferromagnética a una fase paramagnética. Por arriba de esta temperatura la aleación va perdiendo su magnetización a causa de que los espines van orientándose al azar y sus magnetizaciones se van cancelando entre sí.

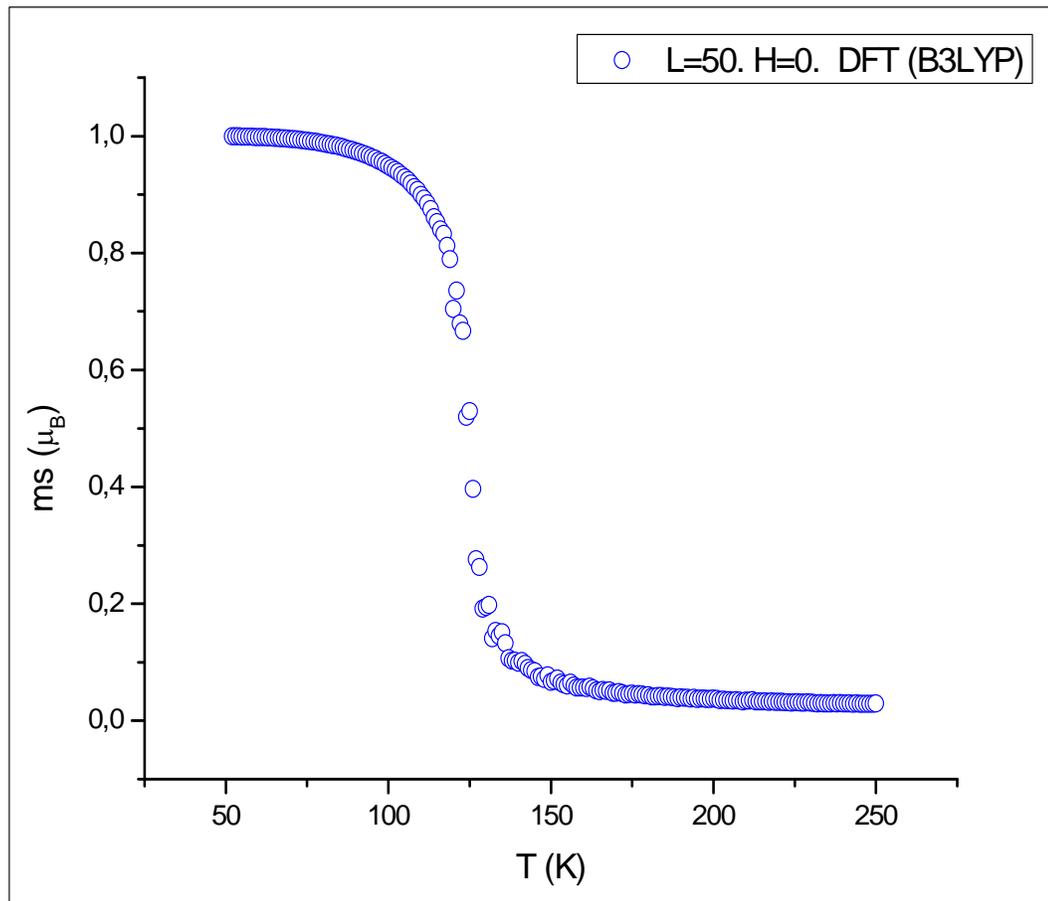


Figura 37. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 38 se observa que la susceptibilidad magnética aumenta desde cero presentando un valor máximo en  $T=124$  K, interpretado como la temperatura de transición magnética de la aleación, en concordancia con la temperatura reportada en la figura 37. Por arriba de esta temperatura, la aleación se va tornando menos susceptible, por lo que los valores de susceptibilidad magnética van disminuyendo en función del aumento de la temperatura hasta llegar a cero. Además se observa un valor pico en  $T=120$  K.

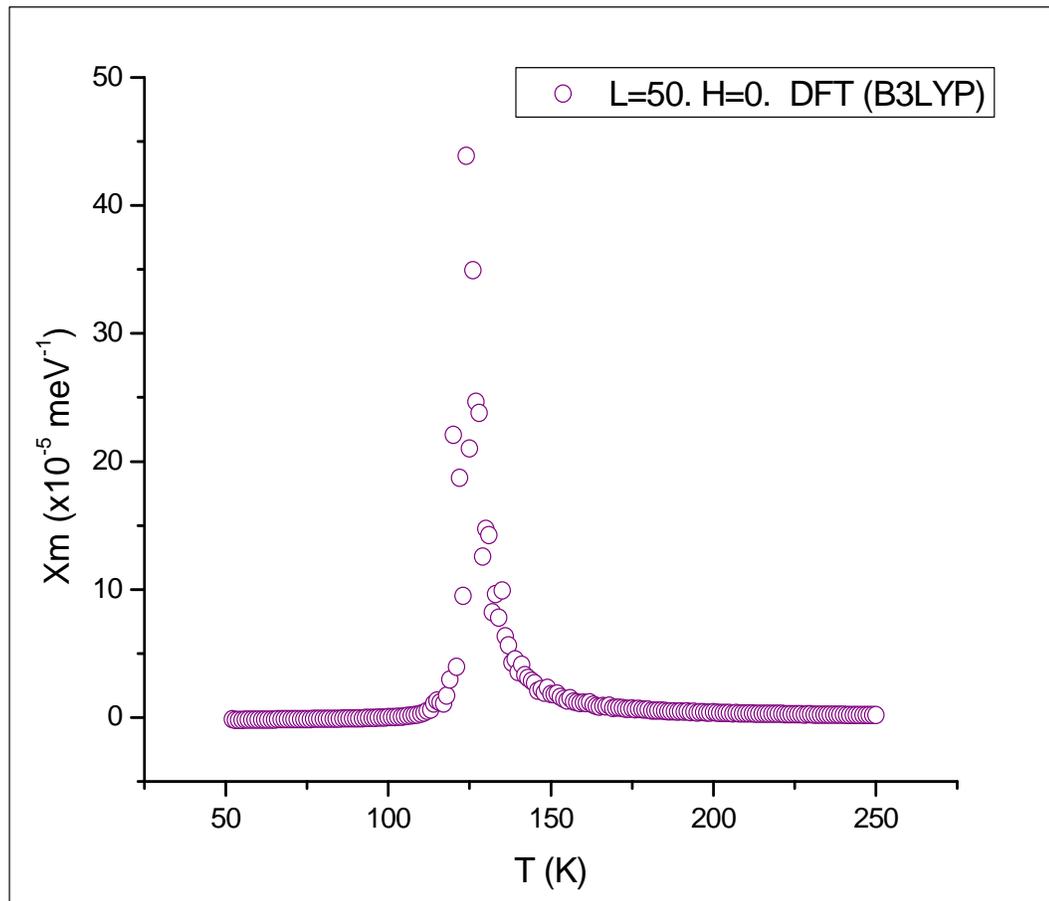


Figura 38. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 39 se evidencia al calor específico aumentando en la aleación a medida que se eleva su temperatura hasta llegar a un valor máximo en  $T=124$  K, que se interpreta como la temperatura de transición magnética en la aleación. Por arriba de esta temperatura, en la aleación va disminuyendo el calor específico. Además se observan valores pico en  $T=122$  K,  $T=126$  K y  $T=135$  K que podrían atribuirse a transiciones estructurales en la aleación.

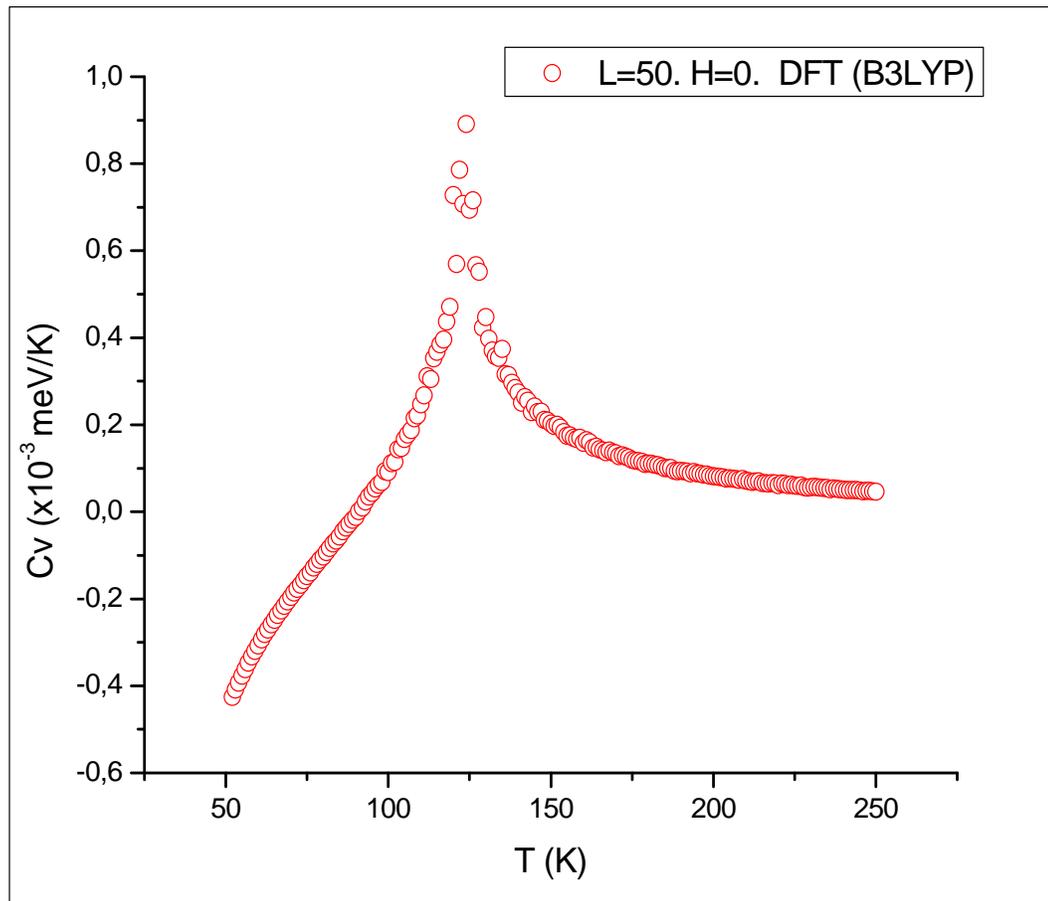


Figura 39. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 40 se observa como aumenta la energía total de la aleación a medida que se eleva su temperatura. Se puede ver que existe una variación grande en la energía total alrededor de  $T=125$  K. También se puede ver en la figura que sin importar la longitud de la red  $L$ , las curvas de energías son iguales a cualquier temperatura.

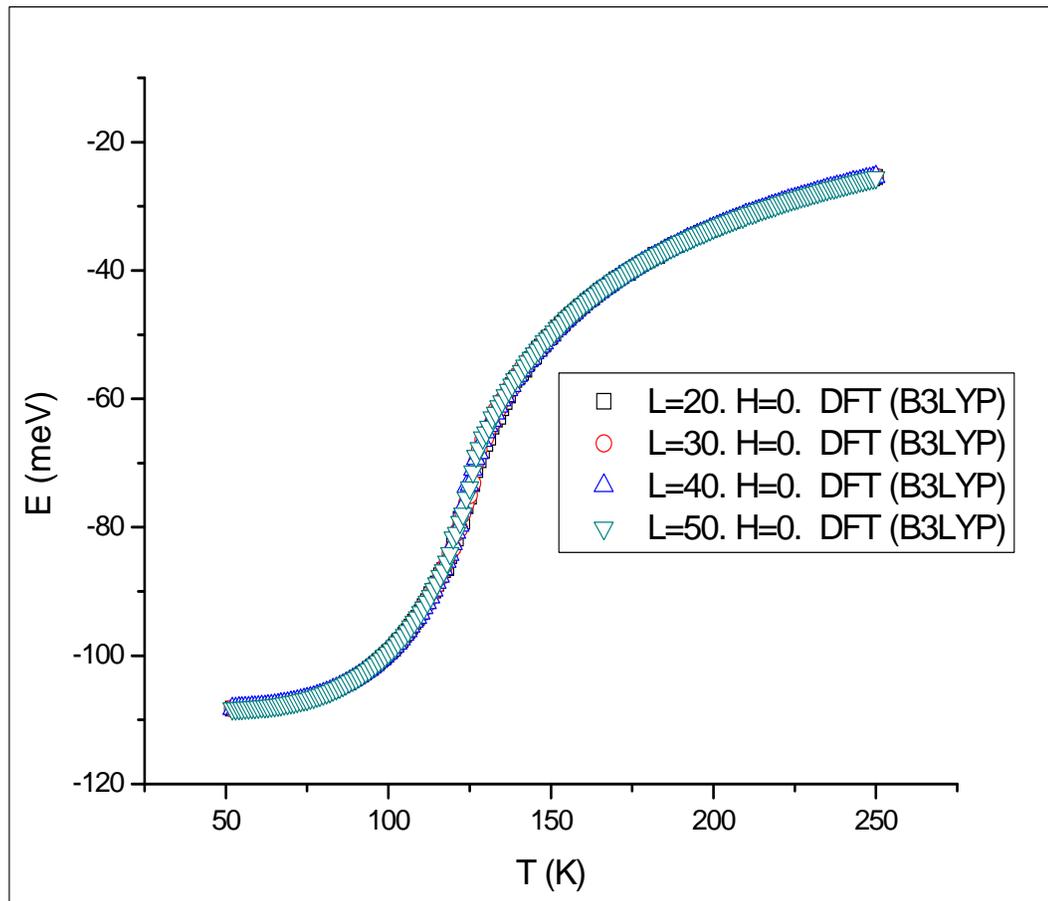


Figura 40. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 41 se observa el descenso de la magnetización por espín a medida que su temperatura se eleva para cualquier valor de  $L$ . Se puede apreciar que existe una dependencia con el tamaño de la red, ya que cuando la longitud de celda  $L$  aumenta, las curvas de magnetización por espín se van haciendo más pronunciadas en términos de su punto de inflexión, haciendo más fácil visualizarlo. Además se puede ver que cuando el tamaño de la red es de 40 y 50, las curvas de magnetización por espín son más cercanas haciendo más fácil ver su punto de inflexión que en este caso fue de  $T=124$  K.

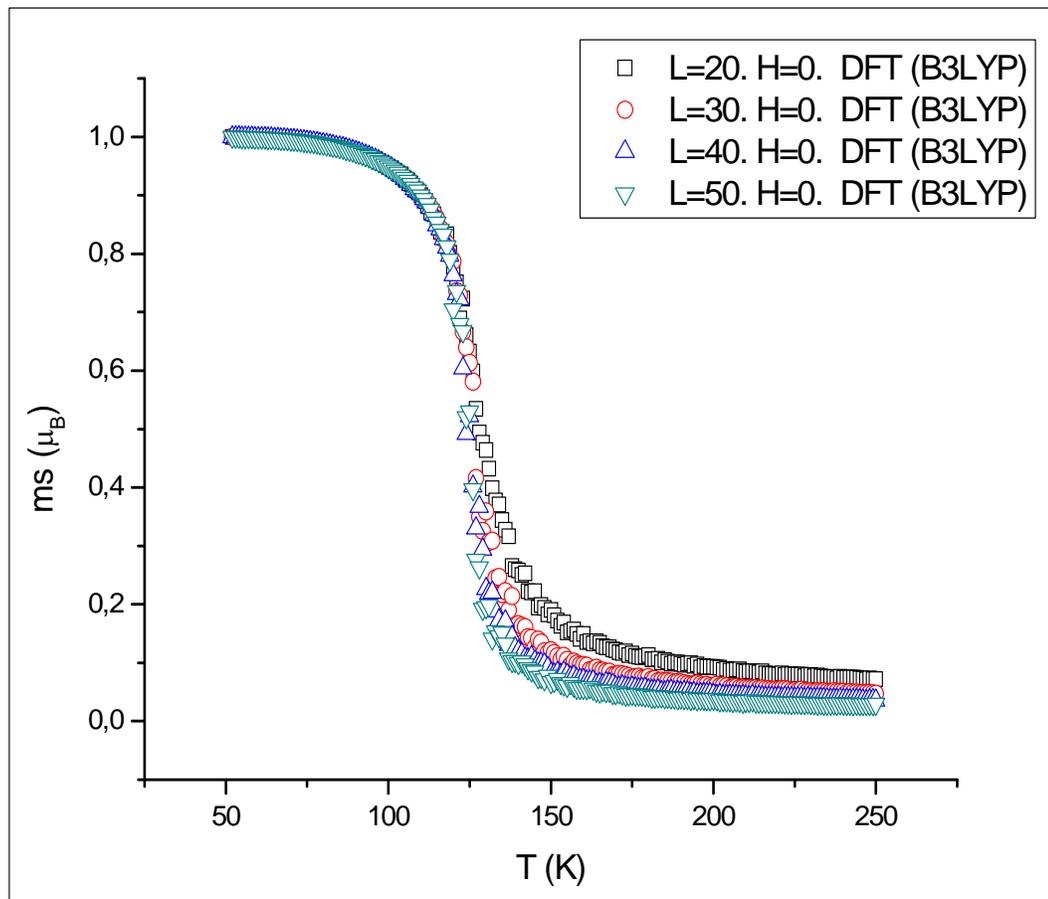


Figura 41. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 42 se evidencia a la susceptibilidad magnética a medida que se eleva su temperatura. Se puede observar que a medida que aumenta  $L$  las curvas de susceptibilidad se estrechan más, siendo las más coincidentes aquellas correspondiente a  $L=40$  y  $L=50$  donde el punto de transición magnética está en  $T=124$  K. Por encima de esta temperatura, la susceptibilidad magnética disminuye rápidamente hasta llegar a cero.

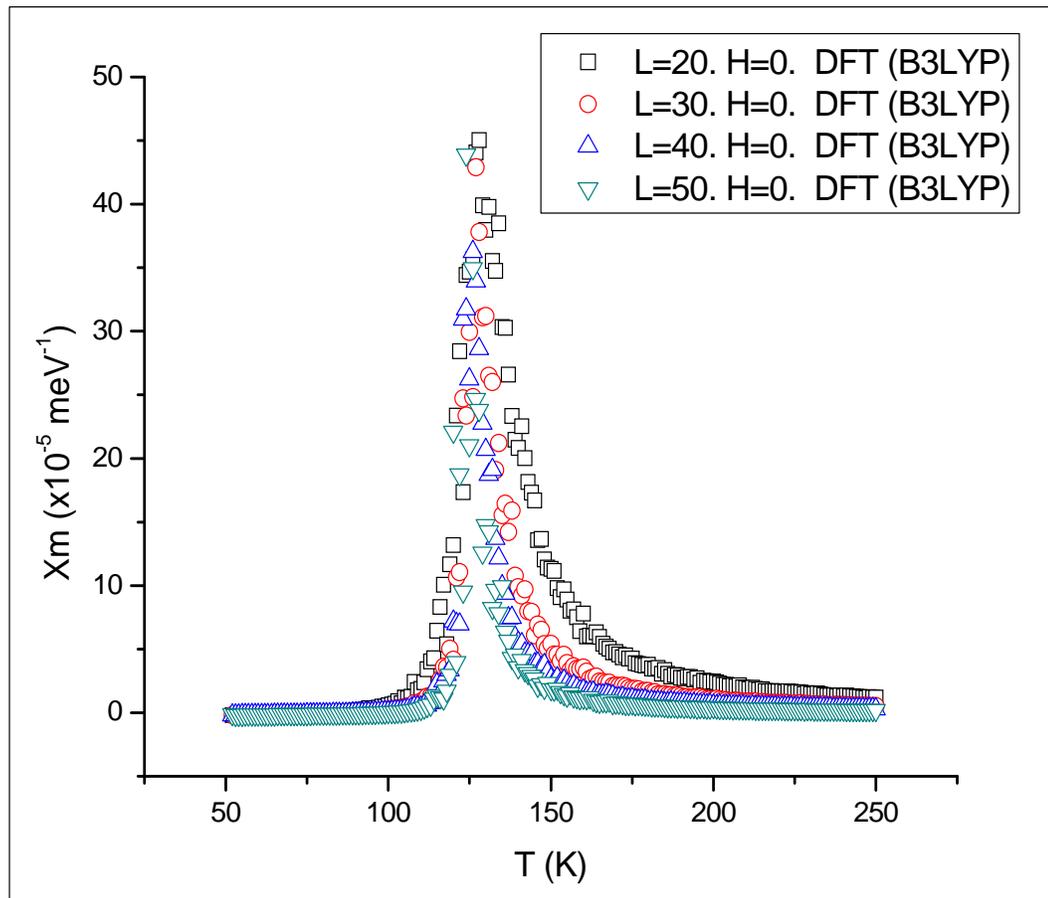


Figura 42. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 43 se observa al calor específico aumentando que a medida  $L$  lo hace también. Los puntos máximos coinciden mejor para valores elevados. En este caso para  $L=40$  y  $L=50$ , la temperatura coincide en 124 K la cual es la temperatura de transición magnética. Por encima de esta temperatura el calor específico empieza a disminuir gradualmente.

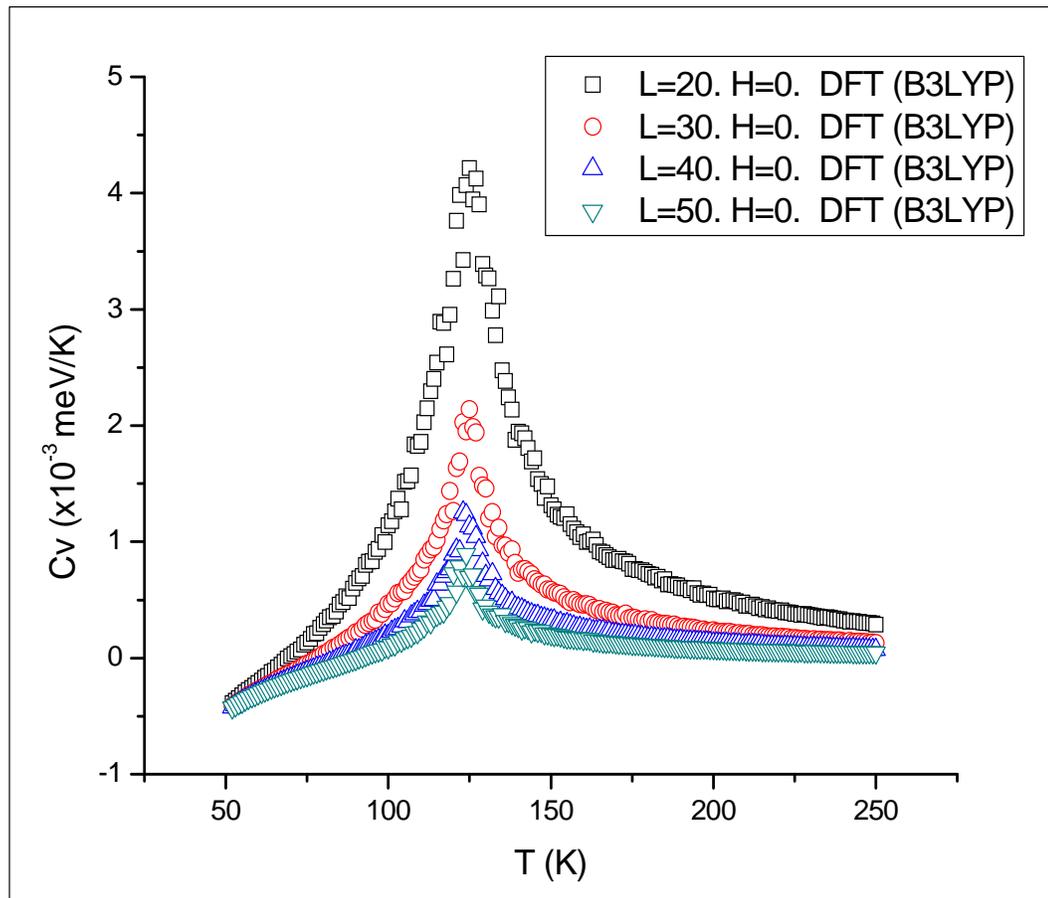


Figura 43. Comportamiento del calor específico en función de la temperatura de la aleación AlTi en ausencia de campo externo para una red bidimensional con distintos valores de longitud de celda utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 44 mostramos como varía la energía total de la aleación en función del aumento de su temperatura. Se puede apreciar un aumento de la energía total a medida que aumenta la temperatura con una variación grande de la energía alrededor de  $T=126 \text{ K}$  que es en donde se da la transición magnética de la estructura.

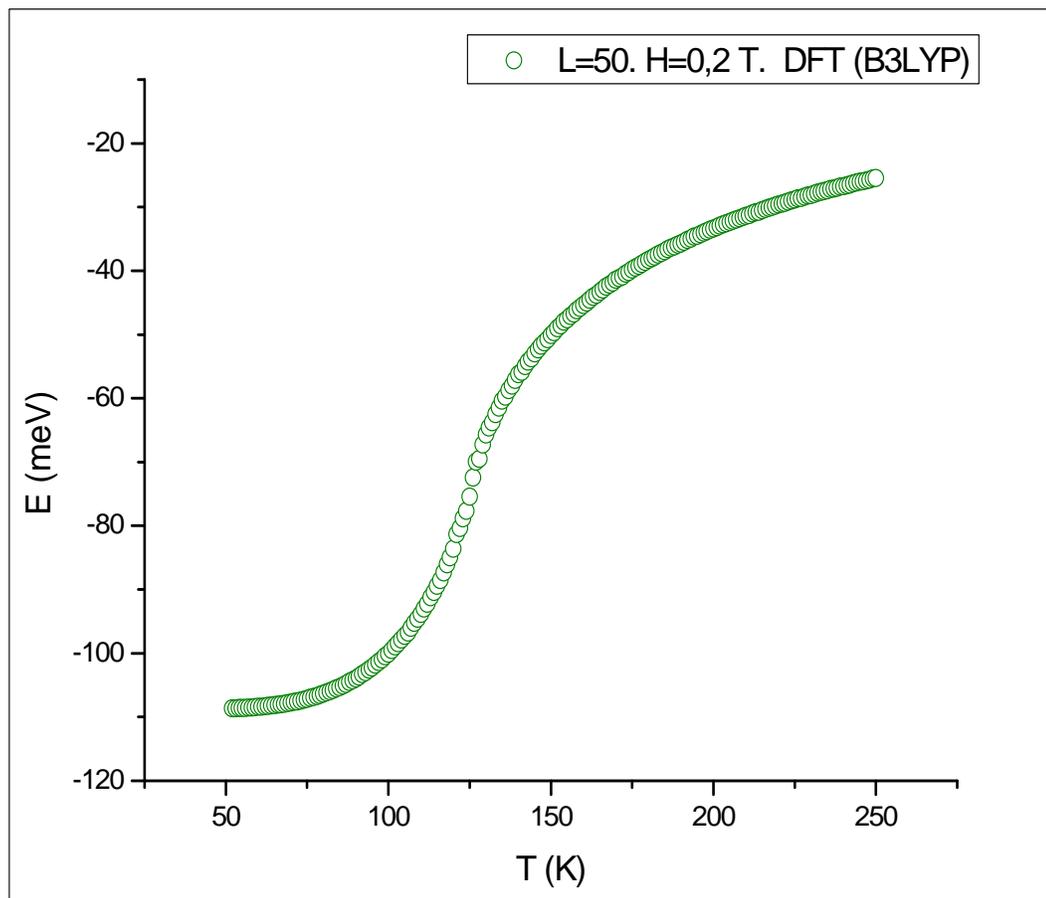


Figura 44. Comportamiento de la energía total en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 45 se reporta el descenso de la magnetización por espín a medida que la temperatura aumenta. Podemos apreciar un descenso rápido alrededor del punto de inflexión en  $T=127$  K interpretado como la temperatura de transición magnética. Por encima de esta temperatura la aleación va perdiendo su magnetización, lo que trae como consecuencia que los espines tornen sus orientaciones al azar.

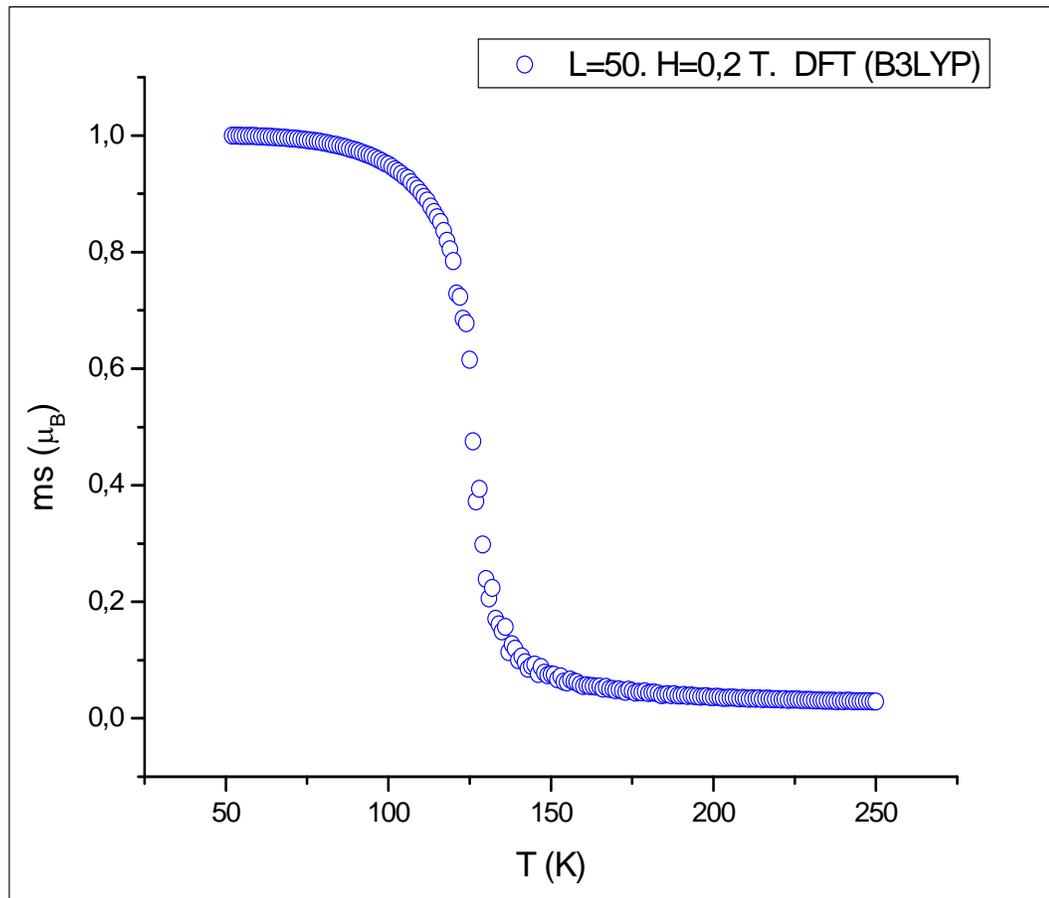


Figura 45. Comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 46 se presenta a la susceptibilidad magnética aumentando hasta llegar a su valor máximo en  $T=127$  K que se interpreta como la temperatura de transición magnética, resultado que concuerda con lo reportado en la figura 45. Por encima de esta temperatura la susceptibilidad disminuye rápidamente hasta llegar a cero. Se observa además un valor pico en  $T=123$  K.

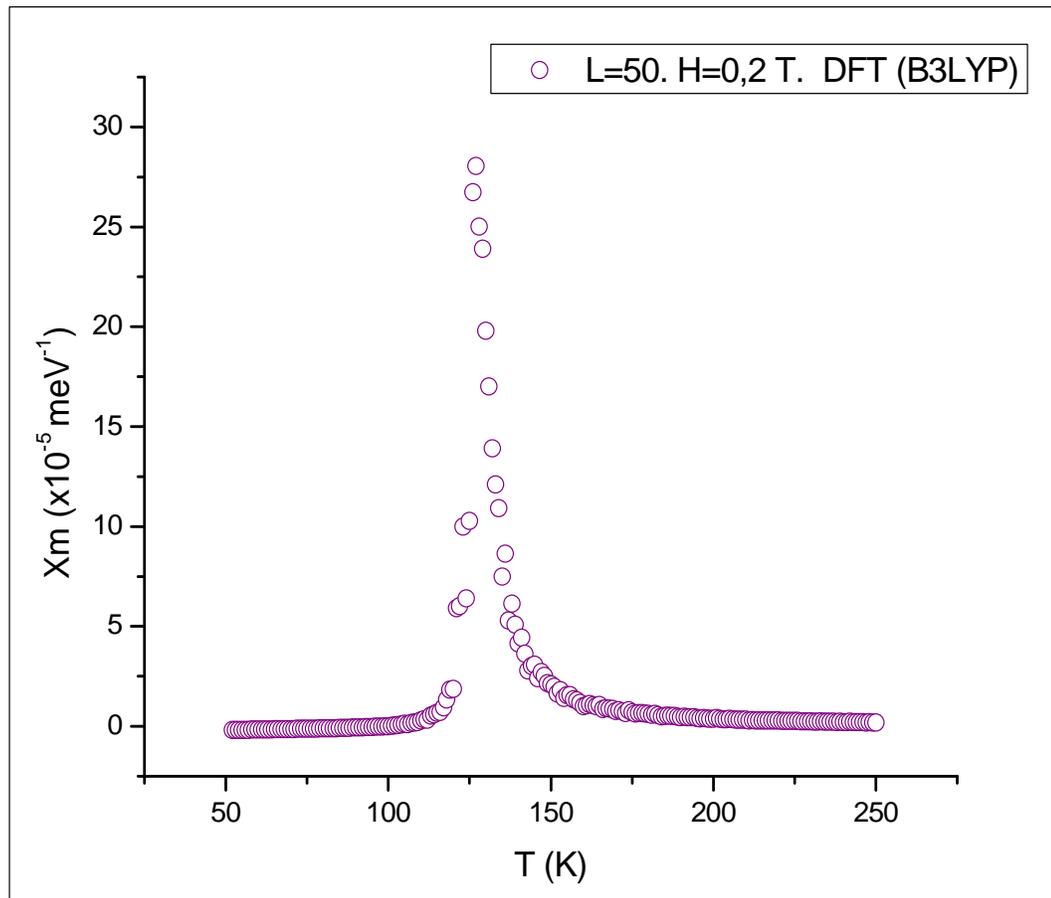


Figura 46. Comportamiento de la susceptibilidad magnética en función de la temperatura de la aleación AlTi con campo magnético externo de magnitud 0,2 T para una red bidimensional de longitud  $L=50$  utilizando DFT mediante el funcional híbrido B3LYP.

En la figura 47 se observa al calor específico aumentando mientras se incrementa la temperatura de la aleación hasta su máximo valor en  $T=127$  K, considerada la temperatura de transición magnética. Por encima de esta temperatura el calor específico disminuye. Además se puede ver un valor pico en  $T=123$  K que podría atribuirse a una transición estructural que sufre la aleación, cuyo resultado concuerda con lo reportado en la figura 46.

## CONCLUSIONES

La constante de intercambio para la aleación AlTi usando el esquema Hartree-Fock fue de 275,56 meV. Usando este esquema, cuando no se tiene presencia de campo magnético externo actuando sobre la aleación, la misma tiene una temperatura de Curie de  $T=636$  K pasando de una fase ferromagnética a una fase paramagnética, temperatura que se corroboró con los resultados obtenidos para susceptibilidad magnética y calor específico correspondiente al mismo caso. Además el comportamiento del calor específico reveló que la aleación presenta picos de transición estructural en  $T=622$  K y  $T=630$  K los cuales concordaron con los picos reportados en el caso de la susceptibilidad magnética. Además se puede decir que la energía total para la aleación AlTi aumenta a medida que lo hace su temperatura mostrando un rápido aumento de la energía en un rango de temperatura cercano a su temperatura de Curie  $T=636$  K.

Para el caso donde se aplica un campo externo de 0,2 T sobre la aleación AlTi, la temperatura de Curie aumentó respecto al caso sin campo magnético externo situándose en  $T=642$  K, resultado que se corroboró con las temperaturas obtenidas para susceptibilidad magnética y calor específico correspondiente al mismo caso, donde se hallaron picos de transición estructural en el caso del calor específico en  $T=610$  K,  $T=624$  K y  $T=630$  K, los cuales coincidieron con los picos reportados en el comportamiento de la susceptibilidad magnética para el mismo caso.

La constante de intercambio para la aleación AlTi usando el esquema DFT mediante la aproximación LSDA fue de 274,01 meV. Usando este esquema, cuando no se tiene presencia de campo magnético externo actuando sobre la aleación AlTi la misma tiene una temperatura de Curie de  $T=631$  K pasando de una fase ferromagnética a una fase paramagnética, temperatura se corroboró con los resultados obtenidos para susceptibilidad magnética y calor específico correspondiente al mismo caso. Además el comportamiento del calor específico reveló que existen picos de transición estructural en  $T=615$  K,  $T=618$  K,  $T=624$  K los cuales concordaron con los picos reportados para el caso de la susceptibilidad magnética. Además se puede decir que la energía total para la aleación AlTi aumenta a medida que lo hace su temperatura mostrando un rápido aumento de la energía en un rango de temperatura cercano a su temperatura de Curie  $T=631$  K.

Para el caso donde se aplica un campo externo de 0,2 T sobre la aleación AlTi, la temperatura de Curie aumentó situándose en  $T=639$  K, resultado que se corroboró con las temperaturas obtenidas para susceptibilidad magnética y calor específico correspondiente al mismo caso en los cuales se hallaron picos de transición estructural en  $T=610$  K,  $T=624$  K y  $T=630$  K para el caso de calor específico los cuales concordaron con los picos reportados en el comportamiento de susceptibilidad magnética para el mismo caso.

La constante de intercambio para la aleación AlTi usando el esquema DFT con la aproximación mediante el funcional híbrido B3LYP fue de 54,17 meV. Usando este esquema, cuando no se tiene presencia de campo magnético externo actuando sobre la aleación AlTi la misma tiene una temperatura de Curie de  $T=124$  K pasando de una fase ferromagnética a una fase paramagnética, temperatura que se corroboró con los resultados obtenidos para susceptibilidad magnética y calor específico correspondiente al mismo caso. Además el comportamiento del calor específico reveló que la aleación presenta picos de transición estructural en  $T=122$  K,  $T=126$  K,  $T=135$  K cuyos picos coincidieron con lo reportado para el comportamiento de la susceptibilidad magnética en el mismo caso. Además se puede decir que la energía total para la aleación AlTi aumenta a medida que lo hace su temperatura mostrando un rápido aumento de la energía en un rango de temperatura cercano a su temperatura de Curie  $T=124$  K.

Para el caso donde se aplica un campo externo de 0,2 T sobre la aleación AlTi, la temperatura de Curie aumentó situándose en  $T=127$  K, resultado que se corroboró con las temperaturas obtenidas para el calor específico correspondiente en los cuales se exhibieron picos de transición estructural en  $T=123$  K concordante con lo reportado para el comportamiento de la susceptibilidad magnética del mismo caso.

En general, el modelo de Ising es un modelo que permite determinar con eficacia el punto de transición magnética en una estructura mediante el método Monte Carlo siendo el algoritmo utilizado el de Metrópolis. Por otra parte, la longitud de celda es un factor determinante a la hora de determinar la temperatura de Curie de un material. Se puede decir que dicha temperatura ofrece valores confiables cuando la longitud de celda es superior a 40 si la simulación se hace con el modelo de Ising en dos dimensiones a través de método Monte Carlo. Sin embargo para el caso de la energía total, el comportamiento de esta última es

independiente del tamaño de la red, por lo que sin importar el valor de la longitud de celda, la energía total siempre mantendrá su comportamiento.

La temperatura de Curie es más fácil de determinar en un material a través de la curva de su magnetización por espín, ya que por medio de la susceptibilidad magnética y calor específico aparecen picos adicionales los cuales muchas veces hacen difícil determinar la temperatura de Curie.

## RECOMENDACIONES

Si se pretende hallar la temperatura de Curie de un material utilizando el modelo de Ising de dos dimensiones a través del método Monte Carlo con el algoritmo de Metrópolis, se sugiere hacer las siguientes recomendaciones:

- Considerar utilizar como longitud de celda aquellos valores que sean superior a  $L=40$  para ofrecer mejor calidad en la generación de resultados.
- Considerar asignar rangos de temperatura con un incremento de temperatura de 1 K, ya que genera mayor precisión a la hora de visualizar el punto de inflexión en la curva de magnetización por espín y los picos de transición en las gráficas de susceptibilidad magnética y calor específico.
- Utilizar como referencia principal para hallar la temperatura de Curie el comportamiento de la magnetización por espín en función de la temperatura a través de su punto de inflexión, ya que los comportamientos de susceptibilidad magnética y calor específico generan además del pico de transición magnética otros picos los cuales hacen difícil hallar la temperatura de Curie.

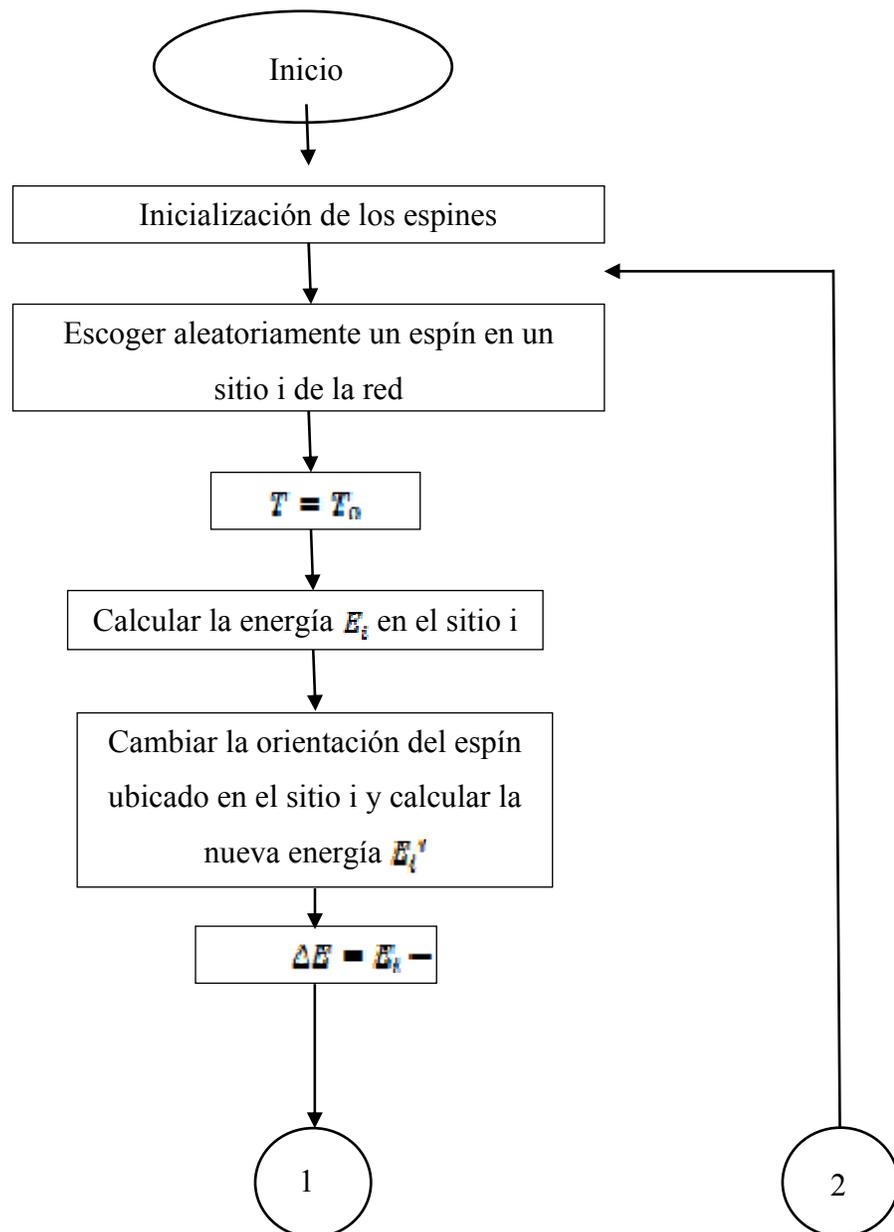
## BIBLIOGRAFÍA

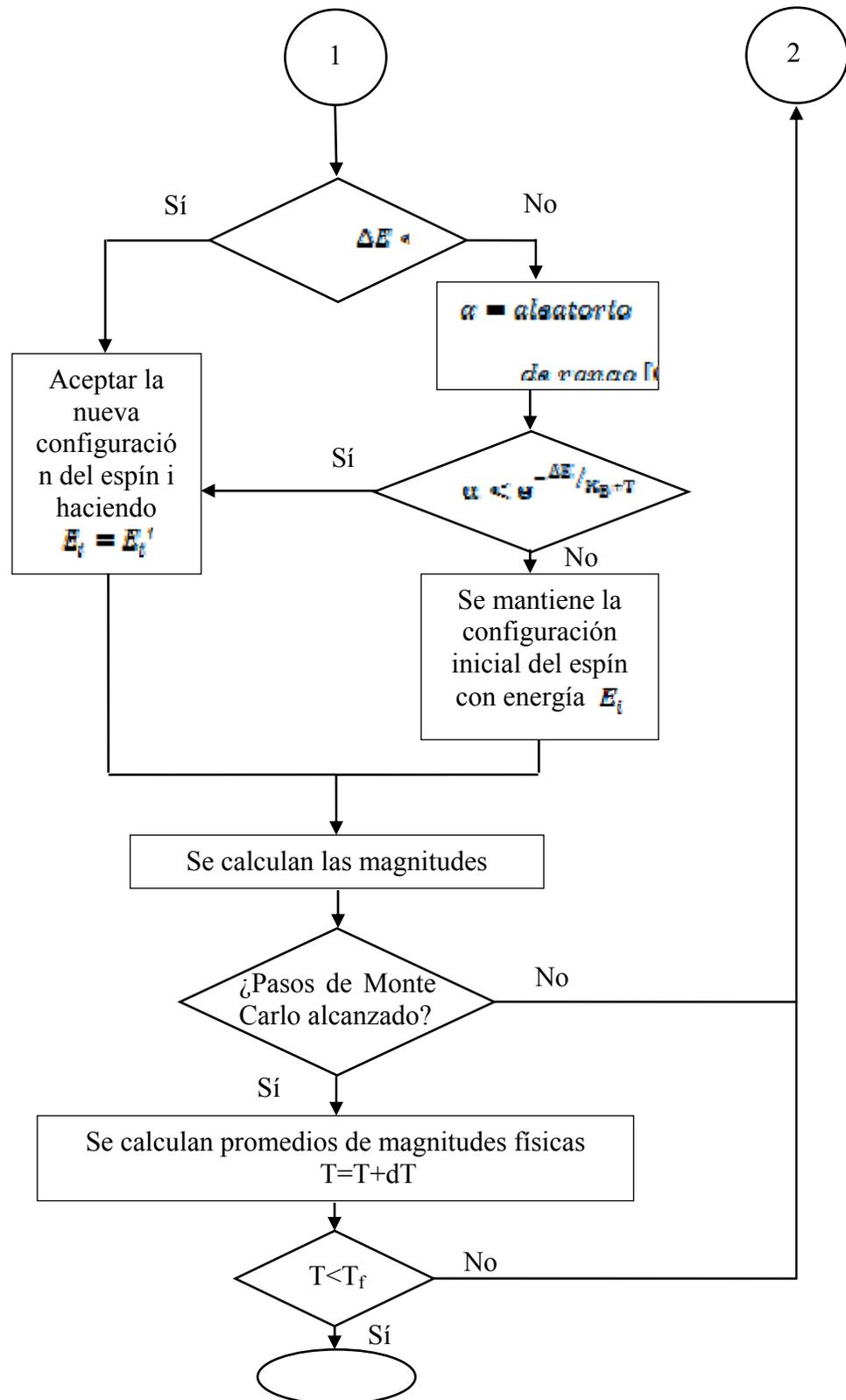
- [1] Pilarczyk, W.; Nowosielski, R.; Nowak, M. y Kciuk, M.. August 2008. The structural changes of Al-Ti-Fe alloy during mechanical alloying process. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*. 2, 29: 131-138.
- [2] Zhuxian, Q.; Mingjie, Z.; Yaxin, Y.; Zhenghan, C.; Grjotheim, K. y Kvande, H. 1988. Formation of aluminum-titanium alloys by electrolysis and by thermal reduction of titania in cryolite-alumina melts. *Aluminium*, 64: 606-609.
- [3] Gijothheim, K.; Krohn, C.; Malinovsky, M.; Matiasovsky, K. y Thonstad, J. 1982. Aluminium Electrolysis. *AluminiumVerlag*, s: 362.
- [4] Manrique, M.; Michelson, C. A., y Santos, C. A.. 2002. Reducción simultanea de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y TiO<sub>2</sub> en celda electrolítica Hall-Herault. *Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales*. 22, 2: 52-56.
- [5] Landau, D. P. y Alben, R.. 1973. Monte Carlo Calculations as an Aid in Teaching Statistical Mechanics. *AJP*.41: 394-400.
- [6] Bravo, P.. 2007. “Materiales Magnéticos”. <http://www.pascualbravo.edu.co/buzon/ferney.rendon/Materiales%20magn%C3%A9ticos.pdf>. (07/12/2009).
- [1] Cypra, B.. 1987. An Introduction to the Ising Model. *The American Mathematical Monthly*. 94, 10: 937-959.
- [2] Landau, D. y Binder, K.. 2005. A Guide To Monte Carlo Simulations In Statistical Physics. Second edition. Cambridge University Press.
- [3] William, P.; Saul, T.; William, V. y Brian, F.. 2007. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing. Third edition. Springer

- [4] Parr, R. y Yang, W.. 1989. Density Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford University Press.
- [7] Hohenberg, P. y Kohn, W. 1964. Inhomogeneous Gas Electron. *Physical Review*. 136, 3B: 864-871.
- [8] Kohn, W. y Sham, J. 1965. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlations Effects. *Physical Review*. 140, 4A: 1133-1138.
- [9] Buchs, M.. 2001. A study of the photophysical and photochemical properties of metal complexes using Density Functional Theory. Trabajo de doctorado. Instituto de Química Inorgánica y Analítica, Suiza.
- [10] Noodleman, L.. 1981. Valence bond description of antiferromagnetic coupling in transition metals dimers. *Journal of Chemistry Physics*. 74, 10: 5737-5743.

## APÉNDICES

### APÉNDICE A. DIAGRAMA DE FLUJO DEL ALGORITMO DE METRÓPOLIS.





Fín

# **Hoja de Metadatos**

<b>Título</b>	<b>COMPORTAMIENTO DE LA MAGNETIZACIÓN EN LA ALEACIÓN AITi</b>
<b>Subtítulo</b>	

**Autor(es)**

<b>Apellidos y Nombres</b>	<b>Código CVLAC / e-mail</b>	
<b>Zabala L., José Antonio</b>	<b>CVLAC</b>	<b>16.719.625</b>
	<b>e-mail</b>	<b>zabalalja@hotmail.com</b>
	<b>e-mail</b>	
	<b>CVLAC</b>	
	<b>e-mail</b>	
	<b>e-mail</b>	
	<b>CVLAC</b>	
	<b>e-mail</b>	
	<b>e-mail</b>	
	<b>CVLAC</b>	
	<b>e-mail</b>	
	<b>e-mail</b>	

**Palabras o frases claves:**

<b>Monte Carlo</b>
<b>Ising</b>
<b>Algoritmo de Metrópolis</b>
<b>Magnetización</b>
<b>Espín</b>
<b>Susceptibilidad Magnética</b>
<b>Calor Específico</b>
<b>Cadena de Markov</b>

**Líneas y sublíneas de investigación:**

Área	Subárea
Ciencias	Física

**Resumen (abstract):**

Se estudiaron usando el método Monte Carlo, las propiedades magnéticas de la aleación AlTi. Se determinó la constante de intercambio para la aleación AlTi usando el esquema de Hartree-Fock la cual fue de 275,56 meV. Se realizó el mismo procedimiento usando esta vez el esquema DFT con dos aproximaciones distintas. En la aproximación mediante el método LSDA, el valor de la constante de intercambio fue de 274,01 meV. Con la aproximación mediante el funcional híbrido B3LYP la constante de intercambio fue de 54,17 meV. Se obtuvieron la energía total, magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico para un rango de temperatura entre 500 K y 800 K con el esquema de Hartree-Fock y la aproximación LSDA. Para el primer esquema la temperatura de Curie fue de  $T=636$  K y para la aproximación LSDA la temperatura de Curie fue  $T=631$  K. Se repitió el procedimiento anterior con la aproximación mediante el funcional B3LYP entre 50 K y 250 K encontrándose la temperatura de Curie en  $T=124$  K.

Los procedimientos anteriormente mencionados se hicieron además variando la longitud de celda entre  $L=20$  y  $L=50$  para todos los esquemas mencionados, encontrándose que las temperaturas de Curie determinadas coincidían cuando  $L=40$  y  $L=50$ . Se procedió de la misma forma en dicha aleación trabajando para este caso en la implementación de una pequeña perturbación por parte de un campo magnético externo de magnitud 0,2 T, lo que arrojó para el esquema Hartree-Fock y la aproximación LSDA las temperaturas de Curie  $T=642$  K y  $T=639$  K respectivamente. Para la aproximación mediante el funcional B3LYP se obtuvo una temperatura de Curie de  $T=127$  K, concluyendo así que en presencia de un campo magnético externo la temperatura de Curie aumenta.

El modelo de Ising es un modelo que permite determinar con eficacia el punto de transición magnética en una estructura mediante el método Monte Carlo, siendo el algoritmo utilizado el de Metrópolis.

**Contribuidores:**

Apellidos y Nombres	ROL / Código CVLAC / e-mail	
López P., Ramón A.	ROL	C <input type="checkbox"/> A <input checked="" type="checkbox"/> T <input type="checkbox"/> J <input type="checkbox"/> A <input type="checkbox"/> S <input type="checkbox"/> U <input type="checkbox"/> U <input type="checkbox"/>
	CVLAC	5.080.995
	e-mail	rlopez@udo.edu.ve
	e-mail	
Betarcourt E., Angel	ROL	C <input type="checkbox"/> A <input type="checkbox"/> T <input type="checkbox"/> J <input type="checkbox"/> A <input type="checkbox"/> S <input type="checkbox"/> U <input type="checkbox"/> U <input checked="" type="checkbox"/>
	CVLAC	8.434.642
	e-mail	A.E.Betancourt@gmail.com
	e-mail	
Blanco, José G.	ROL	C <input type="checkbox"/> A <input type="checkbox"/> T <input type="checkbox"/> J <input type="checkbox"/> A <input type="checkbox"/> S <input type="checkbox"/> U <input type="checkbox"/> U <input checked="" type="checkbox"/>
	CVLAC	14.008.351
	e-mail	Jgblanco77@hotmail.com
	e-mail	
	e-mail	

**Fecha de discusión y aprobación:**

Año      Mes      Día

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

Lenguaje: SPA

**Archivo(s):**

<b>Nombre de archivo</b>	<b>Tipo MIME</b>
Tesis_ZabalaJ.doc	Application/word

**Alcance:**

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

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

**Título o Grado asociado con el trabajo:**

**Licenciado en Física**

---

**Nivel Asociado con el Trabajo:** **Licenciado**

---

**Área de Estudio:**

**Física de la materia condensada**

---

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

**Universidad de Oriente**

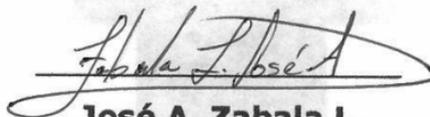
---

---

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

## Derechos:

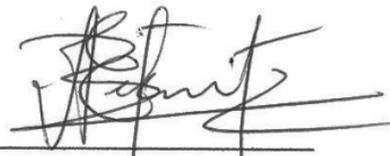
Yo, José A. Zabala L. titular de la cédula de identidad C.I.V. 16.719.625, en mi calidad de autor del trabajo intitulado "COMPORTAMIENTO DE LA MAGNETIZACIÓN EN LA ALEACIÓN AlTi", realizado como requisito parcial para optar al título de LICENCIADO EN FÍSICA, autorizo a la Universidad de Oriente el libre uso de este trabajo. Los terceros deben citar la fuente para la reproducción parcial o total del texto.



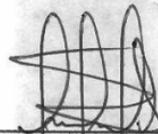
**José A. Zabala L.  
AUTOR**



**Ramón A. López P.  
TUTOR**



**Angel Betancourt  
JURADO 1**



**José G. Blanco  
JURADO 2**



**POR LA COMISIÓN DE TESIS:**

