

Propiedades magnéticas en aleaciones $\text{Cu}_{3-x}\text{AlMn}_x$

R. López-Planes^{a,b}, V. González^b, U. Guevara^a, J. Blanco^a y E. Díaz^b

^aDepartamento de Física, Universidad de Oriente, Apartado Postal 245 Cumaná, 6101, Venezuela,

^bUniversidad de Oriente, IBCA, Departamento de Ciencia de los Materiales,

e-mail: ralopez@sucre.udo.edu.ve

Recibido el 24 de noviembre de 2003; aceptado el 30 de abril de 2004

Presentamos un modelo fenomenológico para estudiar las propiedades magnéticas en aleaciones $\text{Cu}_{3-x}\text{AlMn}_x$ con x comprendido entre 0 y 1. El cálculo se realiza usando el método de Monte Carlo, y los resultados se comparan con los valores experimentales reportados en la literatura. El modelo reproduce satisfactoriamente el comportamiento de estas propiedades.

Descriptores: Aleaciones; Monte Carlo; magnetización.

A phenomenological model is presented for the study of magnetic properties in $\text{Cu}_{3-x}\text{AlMn}_x$ alloys with x between 0 and 1. The calculations were made by Monte Carlo Method, and the results are compared with experimental values showing a good agreement.

Keywords: Alloys; Monte Carlo; magnetization.

PACS: 75.50 Cc; 75.30 Cr; 02.70 Uu

1. Introducción

El desarrollo de nuevos materiales ha implicado el conocimiento de muchas propiedades magnéticas [1] de interés particular, entre estos nuevos materiales están los del tipo Heusler [2], siendo $\text{Cu}_{3-x}\text{AlMn}_x$ uno de los que ofrece mayor interés por su amplio espectro de propiedades magnéticas. En este trabajo aplicamos un modelo para, a través del método de Monte Carlo, calcular las propiedades magnéticas de esta aleación en un intervalo de x que va desde 0 hasta 1.

2. Metodología

El modelo asume un sistema clásico de N átomos distribuidos en una red cúbica $N_x \times N_y \times N_z$, con el espín S_i tomando sólo valores ± 1 de acuerdo a la orientación, los espines se asumen interactuando con sus vecinos más cercanos con una energía de intercambio $-J$ si los espines están alineados paralelamente, es decir; tienen el mismo valor de S , y $+J$ si los vecinos más cercanos tienen valores opuestos de S . Los espines pueden interactuar también con un campo magnético aplicado B , con energía $-\mu S_i B$, donde μ es el momento magnético asociado con cada espín. El sistema obedece el siguiente hamiltoniano:

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

a partir del cual se realizan los cálculos por el método de Monte Carlo. Para una concentración dada distribuimos aleatoriamente las N partículas en una red $L2_1$ con condiciones de contorno periódicas. En cada interacción de Monte Carlo se escoge un espín al azar y se calcula su campo local generado por los otros $N - 1$ espines; luego, una nueva dirección de los espines es considerada para luego calcular el cambio de energía. La transición para una nueva dirección se realiza con la máxima probabilidad. Si no hay transición permitida, se realiza un cambio en la dirección del espín y se repite

el proceso. Para cada concentración calculamos a diferentes temperaturas, las fluctuaciones de la magnetización M y la energía H :

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

y

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_x N_y} H_i e^{-\beta H}}{\sum_i e^{-\beta H_i}}. \quad (3)$$

Para inicializar el cálculo a una temperatura dada se crea una configuración donde todos los espines están alineados en una misma dirección. Para asegurar el equilibrio se hacen 500 pasos de Monte Carlo por espín para cada temperatura antes de calcular los promedios. Cada dos pasos de Monte Carlo se toman los valores instantáneos de la energía y la componente z de la magnetización, el proceso se repite 5000 veces para calcular los promedios. Para realizar los cálculos a una nueva temperatura, se toma la configuración final de la temperatura anterior como la nueva configuración.

3. Resultados y discusión

Hemos calculado la susceptibilidad magnética para cada concentración, la Fig. 1 muestra el comportamiento del inverso de la susceptibilidad con respecto a la temperatura, la cual fue escalada respecto a la temperatura crítica; mientras que en la Fig. 2 se observa cómo varía el calor específico con respecto a la temperatura para una concentración dada, el valor más alto del calor específico corresponde a la temperatura crítica de transición. Los resultados obtenidos por el cálculo de las temperaturas críticas se presentan en la Fig. 3, donde se comparan con valores reportados en la literatura, observándose que en el intervalo estudiado, el modelo da las temperaturas

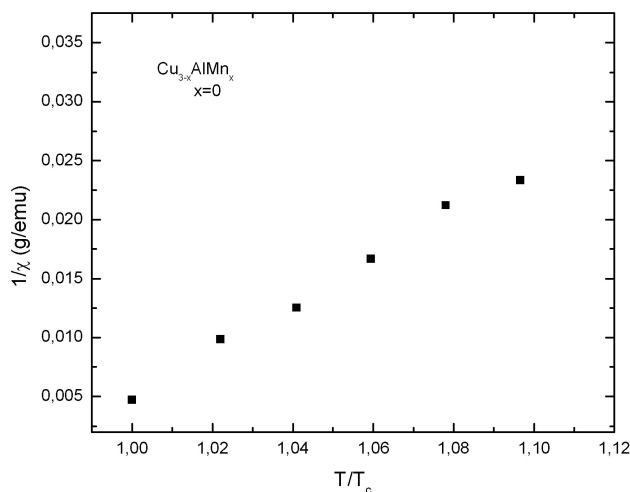


FIGURA 1. Comportamiento característico de la susceptibilidad magnética con respecto a la temperatura obtenido por el cálculo de Monte Carlo. Las temperaturas críticas corresponden al máximo de la susceptibilidad.

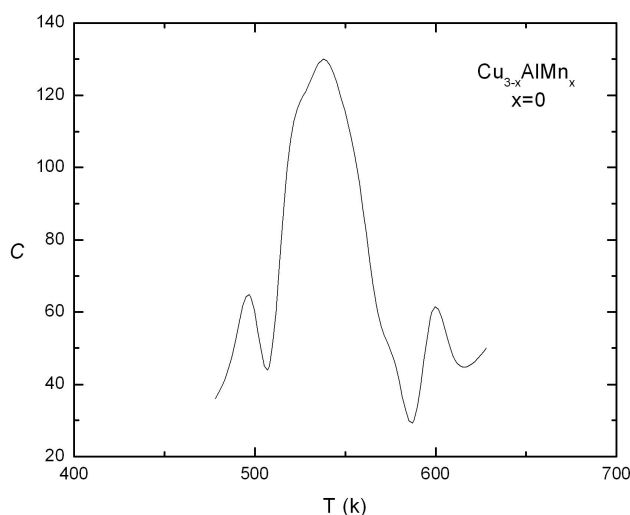


FIGURA 2. Comportamiento característico del calor específico con respecto a la temperatura obtenido por el cálculo de Monte Carlo. Las temperaturas críticas corresponden al máximo de la susceptibilidad.

críticas dentro del margen experimental, sin embargo en la medida que aumenta la concentración de Mn, se observa que las temperaturas calculadas se separan de las experimentales, esto quizás a que no se toma en cuenta en el modelo el nuevo orden estructural presente en la aleación, las tempera-

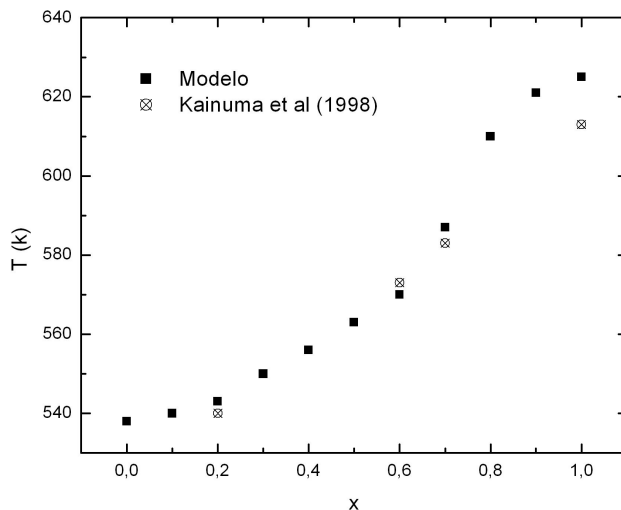


FIGURA 3. Las temperaturas críticas obtenidas por el modelo mediante el método de Monte Carlo son comparadas con los resultados experimentales.

turas críticas calculadas se comparan con valores experimentales[3] reportados.

4. Conclusiones

El modelo que hemos presentado es fenomenológico, de interacción entre primeros vecinos. Estas aleaciones corresponden a un sistema de interacción casi – localizado, este grado de localización debe tomarse en cuenta para el cálculo apropiado. Propiedades magnéticas tales como la susceptibilidad magnética, el calor específico y las temperaturas críticas son descritas satisfactoriamente por el modelo en el intervalo de concentraciones estudiadas, pudiendo ser comparadas con valores experimentales reportados en la literatura. El éxito del modelo se apoya en la idea de que la magnetización es producida por la interacción de los primeros vecinos para un momento localizado. La descripción apropiada de las propiedades magnéticas estudiadas, al ser comparadas con los valores experimentales, hacen válido el modelo y brinda una manera de calcular propiedades magnéticas en un buen intervalo de concentraciones.

Agradecimientos

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

1. K. Ullakko, P.T. Jakovenko y V.G. Gavriljuk, in *Proceeding of Smart Structures and Materials*, ed. V.V. Varadan y J. Chandra, **2715**, SPIE, San Diego, USA, (1996) 45.
2. T.V. Yefimova, V.V. Kokorin, V.V. Polotnyuk y A.D. Shevchen-

ko, *Phys. Met. Metallogr.* **64** (1987) 189.

3. R. Kainuma, N. Satoh, X.J. Liu, I. Ohnuma y K. Ishida *J. Alloys Comp.* **266** (1998) 191.