

UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS

FERROMAGNETO DE HEISENBERG
ANISOTROPICO CON INTERCAMBIO
BICUADRATICO EXPLICITO

RICARDO PINTANEL HORTA

Julio 1985

FERROMAGNETO DE HEISENBERG
ANISOTROPICO CON INTERCAMBIO
BICUADRATICO EXPLICITO

Tesis
entregada a la
Facultad de Ciencias
Universidad de Chile
en cumplimiento parcial de los requisitos
para optar al Grado de
Magister en Ciencias Físicas

por

RICARDO PINTANEL HORTA

Profesor Patrocinante: Dr. Rodrigo Ferrer P.

FACULTAD DE CIENCIAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

INFORME DE APROBACION
TESIS DE MAGISTER

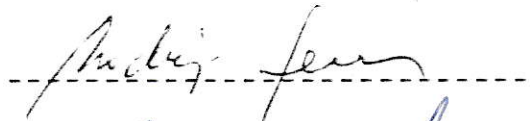
Se informa a la Escuela de Posgrado de la Facultad de Ciencias
que la Tesis de Magister presentada por el candidato

RICARDO PINTANEL HORTA

ha sido aprobada por la Comisión Informante de Tesis como requi-
sito de Tesis para el Grado de Magister en Ciencias Físicas.

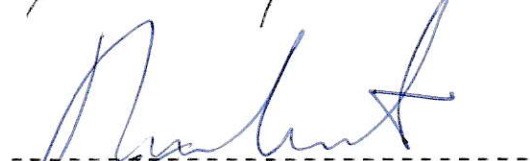
Patrocinante Tesis:

Dr. Rodrigo Ferrer



Comisión Informante de Tesis:

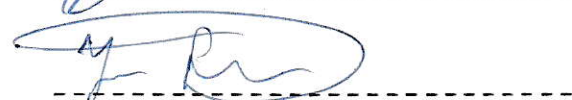
Dr. Miguel Lagos I.



Dn. Luis Moraga J.



Dn. Jaime Roessler B.



Dedicada a todos lo que se
interesan en mi trabajo.

Agradezco a todas aquellas personas que me ayudaron en este trabajo. En particular a mis amigos y "colegas": Norman Cruz y José Rogan, por sus valiosas su gerencias y críticas; y al Dr. Rodrigo Ferrer por la oportunidad de trabajar con él.

INDICE

	pág.
RESUMEN	1
INTRODUCCION	2
HAMILTONIANO PARA UN FERROMAGNETO	8
APROXIMACION DE CAMPO MOLECULAR	19
APROXIMACION DE PARES DE OGUCHI	29
APROXIMACION DE ACOPLAMIENTO CONSTANTE	46
RESULTADOS NUMERICOS	54
APENDICES	82
REFERENCIAS	118

RESUMEN

Entre los sistemas magnéticos cuyas propiedades termodinámicas resultan interesantes de estudiar, debido a sus posibles aplicaciones tecnológicas, se encuentran las aleaciones del tipo tierra rara-metal de transición (por ejemplo: Gd-Fe, Gd-Cu, Dy-Ag) tanto en sus fases cristalinas como amorfas.

El análisis teórico está basado en suponer interacciones de intercambio entre los iones magnéticos de modo de describir la termodinámica mediante un Hamiltoniano de Heisenberg con intercambio bicuadrático, agregando además anisotropías cristalinas producidas por los demás iones. La solución se busca utilizando métodos de campo efectivo tales como aproximación de campo molecular y aproximación de pares de Oguchi. La utilización de estos métodos deja de ser inmediata cuando se incluye el término bicuadrático y se requiere de una detallada discusión y un refinamiento respecto a la forma corriente de tratarlas.

Este enfoque permite conocer, al menos cualitativamente, las propiedades magnéticas del sistema en sus fases cristalina y amorfa.

I. INTRODUCCION

Desde épocas remotas se conoce la existencia de materiales que presentan una magnetización, o momento magnético macroscópico, en ausencia de campos externos, cuando se encuentran a una temperatura suficientemente baja. Estos reciben el nombre de materiales ferromagnéticos o ferromagnetos y tienen una gran importancia tecnológica desde hace más de 100 años.

Esta magnetización, llamada magnetización espontánea, es el resultado de una "interacción" entre los átomos magnéticos presentes en el material, los cuales tienden a alinear sus momentos magnéticos estableciéndose un orden de largo alcance.

En un ferromagneto las interacciones favorecen el alineamiento paralelo de los momentos magnéticos. En el cero absoluto el alineamiento es completo y la magnetización tiene su máximo valor posible. Cuando la temperatura comienza a aumentar crece la probabilidad de ocupación de estados de mayor energía y aumentan las fluctuaciones en torno al alineamiento promedio, por lo cual el ordenamiento inicial comienza a desaparecer y la magnetización decrece, gradualmente al

principio y luego muy rápidamente hasta hacerse cero a cierta temperatura llamada temperatura de transición o temperatura de Curie (T_C). Para temperaturas superiores a la temperatura de Curie, región donde predominan los efectos de las fluctuaciones térmicas, la magnetización espontánea es nula.

La idea de que la magnetización espontánea se debe a interacciones entre los átomos magnéticos fue inicialmente propuesta por Pierre Weiss en 1907, sin embargo, las interacciones que él tenía en mente (interacciones entre dipolos magnéticos) resultaron ser muy pequeñas (típicamente del orden de 10^{-4} e.V. $\approx 1^\circ$ K, para dipolos separados por 2 \AA) como para dar cuenta de las temperaturas de transición observadas. No fue sino hasta la aparición de las teorías cuánticas cuando se mostró que las interacciones eran de origen cuántico y una consecuencia directa de las restricciones impuestas a la función de onda por el Principio de Exclusión de Pauli; esto significa que los autovalores de energía dependen de las orientaciones relativas de los spines, efecto que puede ser interpretado en términos de una "interacción" que tiende a orientar los spines, y consecuentemente, a los momentos magnéticos de las partículas (1).

La teoría de bandas en sólidos, que requiere que cada uno de los electrones se mueva en una "órbita" que se

extiende a través del sólido, no calza con el concepto de momentos localizados y las teorías sobre ferromagnetismo han debido dividirse en dos clases: momentos localizados y momentos no localizados; con intentos ocasionales de combinar ambos conceptos. En las sales iónicas el concepto de momentos localizados es ampliamente aceptado, mucho más de lo que lo es en metales, y a pesar de que en las sales se tienen los mismos requerimientos de periodicidad éstos son ignorados y la discusión es dada, invariablemente, usando un modelo localizado. En el grupo de transición 3-d las sales (aisladas), aparentemente, deben ser estudiadas usando un modelo localizado y lo mismo sucede con algunas aleaciones. En metales puros y muchas de sus aleaciones lo mejor es considerar teoría de bandas. En tierras raras el modelo localizado puede usarse tanto para sales como para metales. Pero siempre debe recordarse que ni el modelo localizado ni la teoría de bandas proporcionan un cuadro completo, ambas están basadas en aproximaciones y la teoría que proporcione un estudio completo debe ser una mezcla de ambas (2).

Este fenómeno de magnetización espontánea se presenta tanto en sólidos cristalinos como amorfos. La caracterización del ferromagnetismo en sólidos cristalinos es un problema antiguo y bien conocido para la física de la materia condensada. Mediante el uso del modelo localizado, con algunas

consideraciones y aproximaciones físicamente plausibles, se obtiene el Hamiltoniano (en nuestro caso particular un Hamiltoniano de Heisenberg). Las propiedades y limitaciones del Hamiltoniano de Heisenberg, así como sus principales técnicas de solución (Vg. funciones de Green, ondas de Spin, expansión para altas temperaturas, métodos de campo efectivo, etc.) están ampliamente descritas en la literatura.

Cuando en 1960 Gubanov (3) mostró que podía existir ferromagnetismo en materiales amorfos el análisis teórico de la magnetización, susceptibilidad, temperatura de Curie y la parte magnética del calor específico fue hecho considerando las fluctuaciones de la constante de acoplamiento de Heisenberg (J). Sin embargo, examinando las propiedades magnéticas de la aleación amorfa $TbFe_2$, Rhyne, Pickart y Alperin (4) mostraron que la magnetización y temperatura de Curie son notablemente menores que las correspondientes a la fase cristalina. Para poder describir la gran reducción tanto en T_C (desde 710 K a 388 K) como en la magnetización es necesario considerar fluctuaciones muy grandes de J , las que incluso serían del mismo orden de J (5). Aunque esto puede ser posible en sistemas de aisladores, donde el acoplamiento dependería fuertemente de la superposición de las funciones de onda, es muy poco probable que ocurra en aleaciones tierra rara-metal de transición donde el acoplamiento es más bien del tipo R.K.K.Y.

Este estudio de $TbFe_2$ es particularmente interesante pues se pueden comparar directamente las propiedades de las fases amorfa y cristalina de la misma aleación, en contraste con otros trabajos experimentales donde la fase cristalina para materiales con el mismo porcentaje de composición no es accesible al experimento.

En virtud de lo anterior Harris, Plischke y Zuckermann (5) propusieron un modelo (modelo HPZ) para aleaciones amorfas de tierra rara-metal de transición que además permite una comparación directa con la fase cristalina. Este es un modelo de Heisenberg, en el cual cada spin tiene la misma magnitud pero está sujeto a un campo anisotrópico, local y orientado al azar. Se espera que estos campos de anisotropía sean importantes en $TbFe_2$ amorfo y aleaciones similares, porque en su fase cristalina tienen enorme "anisotropía magneto-cristalina" (6). Además, se supone que la azarosidad en la orientación del campo de anisotropía es la característica más importante del estado amorfo y resulta del desorden topológico de una estructura compacta empaquetada al azar (7), la cual es característica de los materiales amorfos. Por lo tanto, en principio, la anisotropía local puede ser calculada a partir de un modelo estructural detallado. Una detallada discusión acerca del rol de la estructura en las propiedades magnéticas de las aleaciones amorfas aparece en (8).

Usando el modelo HPZ se construirá un Hamiltoniano para un ferromagneto y dadas las características del modelo se compararán las propiedades magnéticas del sistema en sus fases cristalina y amorfa.

II. HAMILTONIANO PARA UN SISTEMA FERROMAGNETICO

En este capítulo se construirá un Hamiltoniano que permita estudiar las propiedades magnéticas de un ferromagneto. La descripción se hará suponiendo los momentos magnéticos localizados.

Consideremos dos iones magnéticos razonablemente cercanos, esto sugiere usar un Hamiltoniano del tipo:

$$\check{H} = \check{H}_1 + \check{H}_2 + \check{H}_{1,2} \quad (2-1)$$

donde \check{H}_1 = Hamiltoniano del 1° ión aislado

\check{H}_2 = Hamiltoniano del 2° ión aislado

$\check{H}_{1,2}$ = Hamiltoniano que da cuenta de la interacción entre los iones e involucra a ambos spines \vec{J}_1 y \vec{J}_2

si cada uno de los iones tiene spin $J_1 = J_2 = 1$, el par acoplado puede tener spin $J = 0, 1, 2$. El Hamiltoniano:

$$\check{H}_{1,2} = -2 J_1 (\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2) - 4 J_2 (\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2)^2 \quad (2-2)$$

que conmuta con el spin total, tiene autovalores: $\epsilon_2 = -2 J_1 + 4 J_2$ (para $J = 2$), $\epsilon_1 = 2 J_1 + 4 J_2$ (para $J = 1$) y $\epsilon_0 = 4 J_1 + 16 J_2$ (para

$J = 0$). La separación entre los tres niveles de energía está determinada por lo que, generalmente, se llama "interacción entre iones" aunque en la práctica es bastante difícil determinar esta separación y decir cuáles son los principales mecanismos que dan origen a ella. Para nuestros propósitos no es necesario preguntarse si la interacción entre iones proviene de un intercambio directo, de un super intercambio o intercambios de otro tipo. Las constantes J_1 y J_2 pueden ser determinadas experimentalmente de modo de obtener la correcta separación de niveles.

El primer término de (2-2) (término bilineal) se conoce como término de Heisenberg, el segundo recibe el nombre de término bicuadrático y puede ser considerado como una corrección al término de Heisenberg, su inclusión en el Hamiltoniano de interacción está ampliamente justificada en la literatura (9, 10, 11). Una justificación más detallada de (2-2) puede encontrarse en (12).

Habiendo determinado un Hamiltoniano que da cuenta de la interacción de un par de iones y por lo tanto nos permite describir tal sistema, debemos generalizar para un conjunto de iones magnéticos interactuantes. Este sistema puede analizarse suponiendo que los iones interactúan libremente de a pares, lo que permite escribir el Hamiltoniano total como

una suma de Hamiltonianos de pares de iones, es decir:

$$\check{H}_{int} = -2 \sum_i \sum_{j>i} f_{ij} \left\{ (\vec{J}_i \cdot \vec{J}_j) + \alpha_{ij} (\vec{J}_i \cdot \vec{J}_j)^2 \right\} \quad (2-3)$$

Con ésto se tiene un Hamiltoniano que, con algunas aproximaciones, permite el estudio de un conjunto de iones interactuantes y las interacciones son isotrópicas.

Por otro lado, en el espíritu del modelo HPZ, se tiene que cada uno de los iones está inmerso en un campo anisotrópico, el cual es originado por el potencial electrostático de los demás iones del sólido.

La determinación de este campo, que actúa como perturbación requiere, primero evaluar el potencial electrostático $V(r, \theta, \varphi)$, debido a los vecinos del ión, en un punto (r, θ, φ) . Basándose en un modelo que considera al ión como carga puntual el potencial, clásicamente, es:

$$V(r, \theta, \varphi) = \sum_j \frac{q_j}{|\vec{R}_j - \vec{r}|} \quad (2-4)$$

donde q_j es la carga del j -ésimo ión, situado en \vec{R}_j

Si el ión magnético tiene carga q_i y está en \vec{r}_i , entonces la energía del potencial cristalino que perturba es:

$$W_P = \sum_i q_i V_i = \sum_i \sum_j' \frac{q_i q_j}{|\vec{R}_j - \vec{r}_i|} \quad (2-5)$$

Generalmente en la sumatoria sobre iones magnéticos (\sum_i) sólo se consideran electrones de capas no llenas, pues el efecto del "campo cristalino" sobre capas llenas (capas cerradas) es significativo sólo a un alto orden en teoría de perturbaciones (2).

Conociendo la energía potencial clásica el Hamiltoniano no perturbativo puede obtenerse aplicando las reglas usuales ($x \rightarrow \check{x}_{op}$, $y \rightarrow \check{y}_{op}$, $z \rightarrow \check{z}_{op}$). Esto significa que el término perturbativo del Hamiltoniano será simplemente la energía potencial clásica:

$$\check{H}_P = W_P = -|e| \sum_i V(r_i, \theta_i, \varphi_i) \quad (2-6)$$

donde se ha puesto $q_i = -|e|$ y la sumatoria se extiende sobre todos los electrones de los iones magnéticos, por lo tanto la tarea consiste en evaluar $V(r_i, \theta_i, \varphi_i)$.

Se sabe que si $|\vec{R}_j| > |\vec{r}|$ entonces:

$$V(r, \theta, \varphi) = \sum_j q_j \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right) \left(\frac{r^l}{R_j^{l+1}} \right) \sum_{m=-l}^l (-1)^m Y_l^{-m}(\theta_j, \varphi_j) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2-7)$$

Por comodidad se definen los "armónicos sectoriales":

$$Z_{l0} \equiv Y_l^0 \quad (2-8-a)$$

$$Z_{lm}^c \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ Y_l^{-m} + (-1)^m Y_l^m \right\} \quad (2-8-b)$$

$$Z_{lm}^s \equiv \frac{i}{\sqrt{2}} \left\{ Y_l^{-m} - (-1)^m Y_l^m \right\} \quad (2-8-c)$$

en términos de ellos el potencial (2-7) se escribe como

$$V(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\alpha} Y^l \gamma_{l\alpha} Z_{l\alpha}(\theta, \varphi) \quad (2-9)$$

donde

$$\gamma_{l\alpha} = \sum_j q_j \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right) Z_{l\alpha}(\theta_j, \varphi_j) / R_j^{l+1}$$

esta es una forma muy conveniente de escribir el potencial. Si los $Z_{l\alpha}$ se expresan en coordenadas cartesianas existe una correspondencia inmediata entre ellos y los operadores equivalentes de Stevens (13), los cuales pueden usarse para evaluar sus elementos de matriz.

Evidentemente la evaluación de los elementos de matriz puede hacerse por integración directa y este método

está claramente descrito en (14). Sin embargo, un método más simple es mediante el uso de un "operador equivalente" a \check{H}_P , este operador consiste en operadores de momento angular, los cuales actúan sobre la parte angular de la función de onda del sistema; en realidad ésta es una aplicación del teorema de Wigner-Eckart (15) y aparece claramente descrito en (13). Básicamente consiste en reemplazar x, y, z por J_x, J_y, J_z , respectivamente, pero siempre cuidando la no conmutación de J_x, J_y, J_z . Esto se logra reemplazando los productos de x, y, z por una expresión que contenga todas las posibles combinaciones diferentes de J_x, J_y, J_z y dividiendo por el número total de combinaciones. De este modo el operador construido tiene las mismas propiedades de transformación, bajo rotaciones, que tiene el potencial (para una explicación más detallada véase (12)).

El término perturbativo se escribe finalmente como:

$$\check{H}_P = \sum_i \sum_{lm} B_i^m O_i^m \quad (2-10)$$

donde B_1^m es el llamado "parámetro del campo cristalino" y O_1^m el operador equivalente de Stevens.

El Hamiltoniano (2-10) puede reducirse considerablemente, pues la invariancia del potencial frente a operaciones de



inversión exige la anulación de términos con l impar; también son nulos los términos tales que $l > 2L$, donde L es el número cuántico orbital del electrón. De modo que para iones del grupo 3-d sólo es necesario considerar $l = 0, 2, 4$ y $l = 0, 2, 4, 6$ para los del grupo 4-f (16).

Existe además numerosa evidencia que demuestra que los términos correspondientes a $l = 4$ son un orden de magnitud menores que los correspondientes a $l = 2$ (16). De este modo una aproximación adecuada es considerar:

$$\check{H}_p = \sum_l (B_2^0 O_2^0 + B_2^2 O_2^2) \quad (2-11)$$

donde:

$$O_2^0 = \{3J_z^2 - J(J+1)\} \quad \text{y} \quad O_2^2 = \{J_x^2 - J_y^2\}$$

Nos restringiremos al caso uniaxial, es decir, supondremos que existe un único eje de anisotropía y consideraremos que el parámetro de campo cristalino es el mismo para todos los iones.

En el caso cristalino todos los iones se encuentran en sitios, de la red, que son equivalentes entre sí, de modo que la dirección del eje de anisotropía es la misma para todos ellos y puede ser escogido coincidente con el eje z de

un sistema de coordenadas externo (este sistema de ejes externos lo define la dirección de la magnetización de la muestra). Por lo tanto, el Hamiltoniano para la perturbación producida por el campo anisotrópico, en el caso cristalino es:

$$\check{H}_{\text{Anisotropía}}^{\text{Cristalino}} = - D \sum_i \check{J}_{iz}^2 \quad (2-12)$$

Por otro lado, un sistema amorfo, se caracteriza por el completo desorden topológico de los iones del sistema, lo que significa que, para cada uno de ellos, la dirección del campo de anisotropía es diferente, es decir el eje de anisotropía, también llamado eje de fácil magnetización, varía su orientación de un sitio a otro. Esto nos obliga a definir un sistema de ejes coordenados solidario a cada ión, donde el eje z de ese sistema coincide con la dirección del campo de anisotropía en ese sitio particular. La perturbación del campo de anisotropía, para el caso amorfo, es descrita por:

$$\check{H}_{\text{Anisotropía}}^{\text{Amorfo}} = - D \sum_i \check{J}_{izi}^2 \quad (2-13)$$

En principio el parámetro D puede tomar, indistintamente, valores positivos y negativos, aunque la evidencia experimental excluye esta última posibilidad.

Habiendo determinado el Hamiltoniano que da cuenta de la anisotropía, tanto para el caso cristalino (2-12) como para el caso amorfo (2-13), estamos en condiciones de escribir un Hamiltoniano para nuestro sistema ferromagnético, ésto se hace agregando (2-12) ó (2-13) a (2-3) y se obtiene:

$$\mathcal{H}_{\text{cristalino}} = -2 \sum_i \sum_{j>i} J_{ij} \{ (\vec{J}_i \cdot \vec{J}_j) + \alpha_{ij} (\vec{J}_i \cdot \vec{J}_j)^2 \} - D \sum_i J_{iz}^2 \quad (2-14)$$

$$\mathcal{H}_{\text{amorfo}} = -2 \sum_i \sum_{j>i} J_{ij} \{ (\vec{J}_i \cdot \vec{J}_j) + \alpha_{ij} (\vec{J}_i \cdot \vec{J}_j)^2 \} - D \sum_i J_{iz}^2 \quad (2-15)$$

En principio, todas las propiedades termodinámicas de un ferromagneto descrito por (2-14) ó (2-15), según se trate de un sistema cristalino o amorfo respectivamente, pueden ser determinadas encontrando los autovalores y autovectores del Hamiltoniano y construyendo la función partición mecánico estadística. En la práctica, este problema, para un cristal tridimensional, es demasiado difícil como para ser solucionado por un "ataque frontal". Los problemas son puramente mecánico estadísticos, pues, como vimos, la idealización del problema físico subyacente se realiza fácilmente y todo lo que queda es la evaluación explícita de la función de partición. Esta evaluación es, por supuesto, la dificultad. Entre la gran variedad de métodos existentes para el análisis mecánico estadístico de un estado ferromagnético, se destacan por su

simplicidad, las aproximaciones de campo efectivo. La característica más importante de las aproximaciones de campo efectivo es que una pequeña sección del "cristal" es tratada exactamente y la interacción (de esta pequeña sección) con el resto es reemplazada por un campo efectivo, cuyas características deben ser determinadas por alguna relación de consistencia físicamente aceptable.

La más simple de tales aproximaciones es la de campo molecular, la que proporciona una teoría conveniente y cualitativamente razonable para aquellas propiedades, tal como la magnetización, que sean la suma de las contribuciones de cada uno de los átomos. Sin embargo, aquellas propiedades que dependen de la interacción entre dos o más átomos están fuera del alcance de la aproximación de campo molecular. Entre las muchas teorías que intentan extender el tratamiento de campo molecular se destacan la aproximación de pares de Oguchi (17) y la aproximación de acoplamiento constante (constant coupling approximation) de Kasteleijn y van Kranendonk (18), la cual es ampliamente usada como la teoría simple más conveniente para estudiar aquellas propiedades que dependen de la correlación entre vecinos más cercanos.

En este trabajo se utilizarán estas aproximaciones (de campo molecular, de pares de Oguchi y de acoplamiento

constante) para describir el comportamiento de un ferromagneto tanto cristalino como amorfo. La inclusión del término bicuadrático hace necesaria una detallada discusión y un refinamiento respecto a la forma corriente de usarlas, en particular la aproximación de acoplamiento constante.

III. APROXIMACION DE CAMPO MOLECULAR

1. Interacción bicuadrática en A.C.M.

Consideremos un Hamiltoniano de intercambio de la forma:

$$\check{H}^I = -2 \sum_{i,j} J_{ij} \{ (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) + \alpha_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 \} \quad (3-1)$$

En ACM el Hamiltoniano (3-1) es reducido a un Hamiltoniano 1-spin, (\check{H}_i^I), reemplazando los operadores de todos los spines \vec{S}_j , con $\vec{S}_j \neq \vec{S}_i$, por sus valores promedio, es decir se desprecian todas las correlaciones entre los pares. Si suponemos que el spin S_j está en un autoestado de \check{S}_{jz} , lo cual es autoconsistente en el sentido de que el Hamiltoniano resultante (\check{H}_i^I) tiene estados estacionarios que son autoestados de \check{S}_{iz} , entonces se pueden reemplazar los operadores \check{S}_j que aparecen en (3-1) por sus valores promedios. De este modo \check{H}_i^I queda en función de $\langle S_{jz} \rangle$ y $\langle S_{jz}^2 \rangle$ (19).

El Hamiltoniano 1-spin resultante es:

$$\check{H}_i^I = -2 \sum_j J_{ij} \{ \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{iz} + \alpha_{ij} [\langle S_{jx}^2 \rangle \check{S}_{ix}^2 + \langle S_{jy}^2 \rangle \check{S}_{iy}^2 + \langle S_{jz}^2 \rangle \check{S}_{iz}^2 - \frac{1}{2} \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{iz}] \} \quad (3-2)$$

donde el eje z ha sido definido por la dirección de alineamiento de los spines en el estado ordenado, con lo cual $\langle S_{jx} \rangle = \langle S_{jy} \rangle = 0$.

Si además usamos que:

$$\langle S_{jx}^2 \rangle = \langle S_{jy}^2 \rangle = \frac{1}{2} S_j(S_j+1) - \frac{1}{2} \langle S_{jz}^2 \rangle \quad (3-3)$$

se tiene que:

$$\chi_i^I = -2 \sum_j f_{ij} \left\{ \left(1 - \frac{1}{2} \alpha_{ij}\right) \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{iz} + \alpha_{ij} [A \check{S}_i^2 + B \check{S}_{iz}^2] \right\} \quad (3-4)$$

donde:

$$A = \frac{1}{2} \{S_j(S_j+1) - \langle S_{jz}^2 \rangle\} \quad \text{y} \quad B = \frac{1}{2} \{3 \langle S_{jz}^2 \rangle - S_j(S_j+1)\} \quad (3-5)$$

el cálculo detallado aparece en el Apéndice # 1.

Considerando interacción sólo con los z primeros vecinos, igual con cada uno de ellos y todos equivalentes entre sí, se puede escribir:

- a) i) $f_{ij} = f_j$ si los iones i, j son primeros vecinos
 ii) $\alpha_{ij} = \alpha$ (3-6-a)

en caso contrario $f_{ij} = \alpha_{ij} = 0$

$$\begin{aligned} \text{b) i) } \langle S_{jz} \rangle &= \langle S_{iz} \rangle = \langle S_z \rangle \\ \text{ii) } \langle S_{jz}^2 \rangle &= \langle S_{iz}^2 \rangle = \langle S_z^2 \rangle \end{aligned} \quad (3-6-b)$$

Para el caso particular de iones con spin=1, los autovalores de energía del Hamiltoniano (3-4) son:

$$E_m^I = -2Z \left\{ \left(1 - \frac{1}{2} \alpha\right) \langle S_z \rangle m + \alpha \left[2 - \langle S_z^2 \rangle + \left(\frac{3}{2} \langle S_z^2 \rangle - 1\right) m^2 \right] \right\} \quad (3-7)$$

con $m=1, 0, -1$.

2. Anisotropía en ACM (caso cristalino)

La anisotropía debida al campo cristalino, producido por los iones vecinos, es descrita por medio del Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}^A = -D \sum_i S_{iz}^2 \quad (3-8)$$

el cual, para el caso 1-spin, se reduce a:

$$\mathcal{H}_i^A = -D S_{iz}^2 \quad (3-9)$$

y sus autovalores de energía son:

$$E_m^A = -D m^2 \quad (3-10)$$

Entonces, el Hamiltoniano completo del sistema, incluyendo anisotropía, es:

$$\check{H}_i = \check{H}_i^I + \check{H}_i^A \quad (3-11)$$

y tiene autovalores: $E_m = E_m^I + E_m^A$, donde:

$$E_m = -2z f \left\{ \left(1 - \frac{1}{2}\alpha\right) \langle S_z \rangle m + \alpha \left[2 - \langle S_z^2 \rangle + \left(\frac{3}{2} \langle S_z^2 \rangle - 1\right) m^2 \right] \right\} - Dm^2 \quad (3-12)$$

estos autovalores dependen de $\langle S_z \rangle$ y $\langle S_z^2 \rangle$, por lo tanto al calcular dichos promedios, en la forma habitual:

$$\langle S_z \rangle = \frac{\sum_m m e^{-E_m/kT}}{\sum_m e^{-E_m/kT}} \quad ; \quad \langle S_z^2 \rangle = \frac{\sum_m m^2 e^{-E_m/kT}}{\sum_m e^{-E_m/kT}} \quad (3-13)$$

se tienen dos ecuaciones de autoconsistencia, que deben ser resueltas en forma simultánea, luego de fijar los parámetros z , α , D y f .

Solucionando las ecuaciones (3-13) se conocen $\langle S_z \rangle$ y $\langle S_z^2 \rangle$, como función de la temperatura, para el caso cristalino, en la aproximación de campo molecular.

3. Caso Amorfo en ACM

Para describir un sistema amorfo el Hamiltoniano que se utiliza es ligeramente diferente del correspondiente al caso cristalino. La primera diferencia es que el término de anisotropía es:

$$\check{H}^A = -D \sum_i \check{S}_i z_i^2 \quad (3-14)$$

donde el eje z_i es el eje de fácil magnetización del ión, este eje es diferente para cada uno de los iones, tal como se mencionó anteriormente. La segunda diferencia es que los valores medios se calculan tomando primero el promedio térmico estadístico mediante el factor de Boltzmann, y luego integrando sobre todas las direcciones del eje de anisotropía del ión. Es decir, para un operador \check{O} se tiene:

$$\langle\langle \check{O} \rangle\rangle \equiv \int_0^{\pi} d\mu \left\{ \frac{\sum_i \langle i | \check{O} | i \rangle e^{-E_i/kT}}{\sum_i e^{-E_i/kT}} \right\} \quad (3-15)$$

donde $\mu = \cos \theta$, con θ el ángulo entre los ejes z (eje externo) y z_i (eje de anisotropía del ión), i.e. $\mu = \hat{z} \cdot \hat{z}_i$; E_i y $|i\rangle$

son los autovalores y autovectores del Hamiltoniano (completo) del sistema.

Por lo tanto, en la aproximación de campo molecular, el Hamiltoniano 1-spin, para iones de spin=1 y tomando interacción sólo con los z primeros vecinos, es:

$$\check{H} = -zJ(2-\alpha)\sigma\check{S}_z - z\alpha JQ\check{S}_z^2 - D\check{S}_{zi}^2 + \text{constante} \quad (3-16-a)$$

$$\sigma = \langle\langle S_z \rangle\rangle, \quad \beta = \langle\langle S_z^2 \rangle\rangle, \quad Q = (3\beta - 2) \quad (3-16-b)$$

Usando la representación en que \check{S}_z es diagonal:

$$(S_z) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad (S_x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (S_y) = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3-17)$$

sea θ el ángulo entre el eje z y el eje z_i , entonces:

$$S_{zi} = -\sin(\theta) S_x + \cos(\theta) S_z \quad (3-18)$$

donde se han considerado sólo rotaciones en torno al eje Y, pues rotaciones en torno al eje z aparecen como un factor de fase en el Hamiltoniano, lo cual no influye en el cálculo de los promedios. Por lo tanto:

$$(S_{z_i}^2) = \begin{bmatrix} \mu^2 + \frac{1}{2} v^2 & -\mu v/\sqrt{2} & \frac{1}{2} v^2 \\ -\mu v/\sqrt{2} & v^2 & \mu v/\sqrt{2} \\ \frac{1}{2} v^2 & \mu v/\sqrt{2} & \mu^2 + \frac{1}{2} v^2 \end{bmatrix} \quad (3-19)$$

con $\mu = \cos \theta$ y $v = \sin \theta = (1 - \mu^2)^{1/2}$

Reemplazando (3-17) y (3-19) en (3-16) se obtiene la matriz hamiltoniana en esa representación, también llamada "representación de ejes externos", esta es:

$$(\mathcal{H}) = \begin{bmatrix} -z f (2-\alpha) \sigma - z \alpha f Q - \left(\frac{1+\mu^2}{2}\right) D & \mu \left(\frac{1-\mu^2}{2}\right)^{1/2} D & -\left(\frac{1-\mu^2}{2}\right) D \\ \mu \left(\frac{1-\mu^2}{2}\right)^{1/2} D & -(1-\mu^2) D & -\mu \left(\frac{1-\mu^2}{2}\right)^{1/2} D \\ -\left(\frac{1-\mu^2}{2}\right) D & -\mu \left(\frac{1-\mu^2}{2}\right)^{1/2} D & z f (2-\alpha) \sigma - z \alpha f Q - \left(\frac{1+\mu^2}{2}\right) D \end{bmatrix} \quad (3-20)$$

Puede también usarse la representación en que \check{S}_{z_i} es diagonal, "representación de ejes locales". En esta se tiene:

$$(S_{zi}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} ; S_z = \sin(\theta) S_{xi} + \cos(\theta) S_{zi} \quad (3-21)$$

por lo tanto:

$$(S_z^2) = \begin{bmatrix} \mu^2 + \frac{1}{2} v^2 & \mu v / \sqrt{2} & \frac{1}{2} v^2 \\ \mu v / \sqrt{2} & v^2 & -\mu v / \sqrt{2} \\ \frac{1}{2} v^2 & -\mu v / \sqrt{2} & \mu^2 + \frac{1}{2} v^2 \end{bmatrix} \quad (3-22)$$

y reemplazando en (3-16) obtenemos la matriz hamiltoniana, en la representación de ejes locales:

$$(\check{H}) = \begin{bmatrix} -z f (2-\alpha) \sigma_{\mu} & -z f (2-\alpha) \sigma \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right)^{1/2} & -z \alpha f Q \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right) \\ -z \alpha f Q \left(\frac{1+\mu^2}{2} \right) - D & -z \alpha f Q \mu \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right)^{1/2} & \\ \hline -z f (2-\alpha) \sigma \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right)^{1/2} & -z \alpha f Q (1-\mu^2) & -z f (2-\alpha) \sigma \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right)^{1/2} \\ -z \alpha f Q \mu \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right)^{1/2} & & +z \alpha f Q \mu \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right)^{1/2} \\ \hline -z \alpha f Q \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right) & -z f (2-\alpha) \sigma \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right)^{1/2} & z f (2-\alpha) \sigma_{\mu} \\ & +z \alpha f Q \mu \left(\frac{1-\mu^2}{2} \right)^{1/2} & -z \alpha f Q \left(\frac{1+\mu^2}{2} \right) - D \end{bmatrix} \quad (3-23)$$

Una vez conocidos los elementos de matriz del Hamiltoniano, en cualquiera de las dos representaciones, el problema consiste en calcular σ y β como función de la temperatura.

Sean E_i y $|i\rangle$ los autovalores y autovectores del Hamiltoniano, calculados respecto a alguna de las representaciones, entonces:

$$\sigma(T) = \int_0^1 d\mu \left\{ \frac{\sum_i \langle i | S_z | i \rangle e^{-E_i(\sigma, \beta, \mu)/kT}}{\sum_i e^{-E_i(\sigma, \beta, \mu)/kT}} \right\} \quad (3-24-a)$$

$$\beta(T) = \int_0^1 d\mu \left\{ \frac{\sum_i \langle i | S_z^2 | i \rangle e^{-E_i(\sigma, \beta, \mu)/kT}}{\sum_i e^{-E_i(\sigma, \beta, \mu)/kT}} \right\} \quad (3-24-b)$$

representa un par de ecuaciones autoconsistentes y acopladas, que al ser resueltas simultáneamente, permite conocer estas magnitudes de interés. Los operadores \check{S}_z y \check{S}_z^2 que aparecen en (3-24) deben ser los correspondientes a la representación usada para evaluar el Hamiltoniano.

Una comparación entre los resultados obtenidos

mediante la solución de la ecuación (3-13) con los obtenidos mediante la solución (3-24), permite establecer las principales similitudes y diferencias en el comportamiento magnético del sólido tanto en sus fases cristalina como amorfa, respectivamente.

La principal deficiencia de la aproximación del campo molecular es la de sustituir todas las interacciones de intercambio, entre los iones, por un campo efectivo proporcional a $\langle S_z \rangle$, de modo que ciertas propiedades de las interacciones $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)$ y $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2$ se pierden completamente. Es precisamente esta deficiencia la que se pretende corregir, en un primer orden, en la Aproximación de Pares de Oguchi.

IV. APROXIMACION DE PARES DE OGUCHI

1. Interacción bicuadrática en APO

La aproximación de pares de Oguchi consiste en considerar un par de iones seleccionados al azar y que sean primeros vecinos entre sí. La interacción entre ellos es tratada exactamente y la de ellos con el resto del cristal mediante un campo efectivo, tipo campo molecular.

El Hamiltoniano de interacción de este par es:

$$\check{H}_{\text{par}}^{\text{I}} = -2J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) - 2\alpha J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)^2 \quad (4-1)$$

Sea $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, el spin total del par; puesto que \vec{S}_1 y \vec{S}_2 conmutan, pues se refieren a iones diferentes, se tiene que:

$$\check{H}_{\text{par}}^{\text{I}} = J(2\check{S}_0^2 - \check{S}^2) - \alpha J(2\check{S}_0^2 \check{S}_0^2 - 2\check{S}_0^2 \check{S}^2 + \frac{1}{2} \check{S}^2 \check{S}^2) \quad (4-2)$$

donde $\check{S}_0^2 = \check{S}_1^2 = \check{S}_2^2$; para el caso de iones con spin=1 el spin total del par es $S=0, 1, 2$, y usando el conjunto completo $\{|S, S_2 SM\rangle \equiv |SM\rangle\}$ los únicos elementos de matriz de $\check{H}_{\text{par}}^{\text{I}}$

distintos de cero son:

$$\begin{aligned}
 \langle 2M | \check{\mathcal{H}}_{\text{par}}^I | 2M \rangle &= -2f(1+\alpha) && (\text{con deg.} = 5) \\
 \langle 1M | \check{\mathcal{H}}_{\text{par}}^I | 1M \rangle &= 2f(1-\alpha) && (\text{con deg.} = 3) \\
 \langle 00 | \check{\mathcal{H}}_{\text{par}}^I | 00 \rangle &= 4f(1-2\alpha) && (4-3)
 \end{aligned}$$

La interacción del par con el resto del cristal se trata, como se dijo anteriormente, mediante ACM; para ello se procede en forma análoga a lo hecho en el capítulo anterior y el Hamiltoniano que da cuenta de tal interacción es:

$$\begin{aligned}
 \check{\mathcal{H}}_{\text{par-c}}^I &= -(z-1)f \{ (2-\alpha) \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{(p)z} + \alpha [S_j(S_j+1) - \langle S_{jz}^2 \rangle] \check{S}_{(p)}^2 \\
 &+ \alpha [3 \langle S_{jz}^2 \rangle - S_j(S_j+1)] \check{S}_{(p)z}^2 \} \quad (4-4)
 \end{aligned}$$

donde $\check{S}_{(p)z}$ y $\check{S}_{(p)z}^2$ se refieren al par y el índice j a cada uno de los primeros vecinos. Nótese que z ha sido reemplazado por $(z-1)$ pues la interacción del ión con uno de sus primeros vecinos fue tratada exactamente y son las $(z-1)$ interacciones restantes las que se tratan con una aproximación de campo molecular.

Por otro lado $\check{S}_{(p)z} = (\check{S}_{1z} + \check{S}_{2z})$ y como todos los iones son iguales entre sí:

$$\begin{aligned} \text{i) } \langle S_{(p)z} \rangle &= \langle S_{1z} + S_{2z} \rangle = \langle S_{1z} \rangle + \langle S_{2z} \rangle = 2 \langle S_{jz} \rangle \\ \text{ii) } \langle S_{(p)z}^2 \rangle &= \langle S_{1z} + S_{2z} \rangle^2 = 2 \langle S_{jz}^2 \rangle + 2 \langle S_{1z} S_{2z} \rangle \end{aligned} \quad (4-5)$$

Considerando que \check{H}_{p-c}^I es diagonal en la base $\{|SM\rangle\}$ y usando (4-5) se tiene que sus autovalores de energía, E_{SM}^I , son:

$$\begin{aligned} E_{22}^I &= \int [-7(2-\alpha) \langle S_{(p)z} \rangle - 21\alpha \langle S_{(p)z}^2 \rangle + 42\alpha \langle S_{1z} S_{2z} \rangle - 28\alpha] \\ E_{21}^I &= \int [3.5(2-\alpha) \langle S_{(p)z} \rangle + 10.5\alpha \langle S_{(p)z}^2 \rangle - 21\alpha \langle S_{1z} S_{2z} \rangle - 70\alpha] \\ E_{20}^I &= \int [21\alpha \{4 - \langle S_{(p)z}^2 \rangle + 2 \langle S_{1z} S_{2z} \rangle\}] \\ E_{2-1}^I &= \int [3.5(2-\alpha) \langle S_{(p)z} \rangle + 10.5\alpha \langle S_{(p)z}^2 \rangle - 21\alpha \langle S_{1z} S_{2z} \rangle - 70\alpha] \\ E_{2-2}^I &= \int [7(2-\alpha) \langle S_{(p)z} \rangle - 21\alpha \langle S_{(p)z}^2 \rangle + 42\alpha \langle S_{1z} S_{2z} \rangle - 28\alpha] \\ E_{11}^I &= \int [-3.5(2-\alpha) \langle S_{(p)z} \rangle - 3.5\alpha \langle S_{(p)z}^2 \rangle + 7\alpha \langle S_{1z} S_{2z} \rangle - 14\alpha] \\ E_{10}^I &= \int [-7\alpha \{4 - \langle S_{(p)z}^2 \rangle + 2 \langle S_{1z} S_{2z} \rangle\}] \end{aligned} \quad (4-6)$$

$$E_{1-1}^I = \left[3.5 (2-\alpha) \langle S_{(p)z} \rangle - 3.5\alpha \langle S_{(p)z}^2 \rangle + 7\alpha \langle S_{1z} S_{2z} \rangle - 14\alpha \right]$$

$$E_{00}^I = 0.$$

(en el cálculo de E_{SM}^I se ha considerado interacción sólo con $z = 8$ primeros vecinos).

En el espíritu de la APO el Hamiltoniano del sistema, sin anisotropía, es:

$$\check{H} = \check{H}_{\text{par}}^I + \check{H}_{\text{p.c}}^I \quad (4-7)$$

y sus autovalores, E_{SM} , están dados por (4-3) y (4-6). El cálculo detallado está en el Apéndice #2-a.

Puesto que \check{H} , $\check{S}_{(p)z}$, $\check{S}_{(p)z}^2$ son diagonales en la base $\{|SM\rangle\}$ el cálculo de $\langle S_{(p)z} \rangle$ y $\langle S_{(p)z}^2 \rangle$ se hace del siguiente modo:

$$\langle S_{(p)z} \rangle = \frac{\sum_{S,M} M e^{-E_{SM}/kT}}{\sum_{S,M} e^{-E_{SM}/kT}} ; \quad \langle S_{(p)z}^2 \rangle = \frac{\sum_{S,M} M^2 e^{-E_{SM}/kT}}{\sum_{S,M} e^{-E_{SM}/kT}} \quad (4-8)$$

sin embargo, $(S_{1z} S_{2z})$ no es diagonal en la base $\{|SM\rangle\}$, por lo que sus elementos de matriz, son evaluados en la base $\{|S_1 S_2 m_1 m_2\rangle\}$, la cual se relaciona con $\{|SM\rangle\}$ por medio de:

$$|SM\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle S_1 S_2 m_1 m_2 | SM \rangle | S_1 S_2 m_1 m_2 \rangle \quad (4-9)$$

donde $\langle S_1 S_2 m_1 m_2 | SM \rangle$ son los coeficientes de Clebsch-Gordan.

El cálculo explícito de los elementos de matriz de $(S_{1z} S_{2z})$ está en el Apéndice #2-b, y muestra que son distintos de cero sólo los siguientes términos:

$$\langle 22 | S_{1z} S_{2z} | 22 \rangle = 1, \quad \langle 20 | S_{1z} S_{2z} | 20 \rangle = -1/3$$

$$\langle 2-2 | S_{1z} S_{2z} | 2-2 \rangle = 1, \quad \langle 10 | S_{1z} S_{2z} | 10 \rangle = -1 \quad (4-10)$$

$$\langle 00 | S_{1z} S_{2z} | 00 \rangle = -2/3, \quad \langle 20 | S_{1z} S_{2z} | 00 \rangle = \langle 00 | S_{1z} S_{2z} | 20 \rangle = -\sqrt{2}/3$$

por lo tanto:

$$\langle S_{1z} S_{2z} \rangle = \frac{\sum_{S, M} \langle SM | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle e^{-E_{SM}/kT}}{\sum_{S, M} e^{-E_{SM}/kT}} \quad (4-11)$$

Los autovalores E_{SM} dependen, explícitamente, de $\langle S(p)z \rangle$, $\langle S(p)z^2 \rangle$ y $\langle S_{1z} S_{2z} \rangle$; por lo tanto (4-8) y (4-11)

representan tres ecuaciones autoconsistentes acopladas que deben ser resueltas, simultáneamente, para conocer estos promedios, en función de la temperatura, luego de fijar los parámetros α , D y \downarrow .

2. Anisotropía en APO (caso cristalino)

Para el caso de "racimo 2-spin" la anisotropía del campo cristalino es descrita por:

$$\check{\mathcal{H}}^A = -D (\check{S}_{1z}^2 + \check{S}_{2z}^2) \quad (4-12)$$

este Hamiltoniano ($\check{\mathcal{H}}^A$) no es diagonal en la base $\{|SM\rangle\}$ por lo que sus elementos de matriz se evalúan en la base $\{|S_1 S_2 m_1 m_2\rangle\}$ la cual se relaciona con $\{|SM\rangle\}$ mediante (4-9), obteniendo:

$$\langle 22 | \check{\mathcal{H}}^A | 22 \rangle = -2D, \quad \langle 21 | \check{\mathcal{H}}^A | 21 \rangle = -D, \quad \langle 20 | \check{\mathcal{H}}^A | 20 \rangle = -(2/3)D$$

$$\langle 2-1 | \check{\mathcal{H}}^A | 2-1 \rangle = -D, \quad \langle 2-2 | \check{\mathcal{H}}^A | 2-2 \rangle = -2D, \quad \langle 11 | \check{\mathcal{H}}^A | 11 \rangle = -D \quad (4-13)$$

$$\langle 10 | \check{\mathcal{H}}^A | 10 \rangle = -2D, \quad \langle 1-1 | \check{\mathcal{H}}^A | 1-1 \rangle = -D, \quad \langle 00 | \check{\mathcal{H}}^A | 00 \rangle = -(4/3)D$$

$$\langle 00 | \check{\mathcal{H}}^A | 20 \rangle = \langle 20 | \check{\mathcal{H}}^A | 00 \rangle = -(2\sqrt{2}/3)D$$

El cálculo detallado está en el Apendice #3.

Al incluir la anisotropía el Hamiltoniano completo del sistema es:

$$\check{H} = \check{H}_{\text{par}}^{\text{I}} + \check{H}_{\text{p-c}}^{\text{I}} + \check{H}^{\text{A}} \quad (4-14)$$

este Hamiltoniano no es diagonal en la base $\{|SM\rangle\}$, por lo que debe ser diagonalizado. Sean E_i y $|i\rangle$ sus autovalores y autovectores, entonces:

$$\langle S_{(p)z} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i \langle i | S_{(p)z} | i \rangle e^{-E_i/kT} \quad (4-15-a)$$

$$\langle S_{(p)z}^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i \langle i | S_{(p)z}^2 | i \rangle e^{-E_i/kT} \quad (4-15-b)$$

$$\langle S_{1z} S_{2z} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i \langle i | S_{1z} S_{2z} | i \rangle e^{-E_i/kT} \quad (4-15-c)$$

donde Z es la función partición, definida de la manera usual:

$$Z = \sum_i e^{-E_i/kT} \quad (4-16)$$

De este modo (4-15) representa un trío de ecuaciones autoconsistentes acopladas, que al ser resueltas en forma simultánea permite conocer la magnetización, $\langle S_{(p)z} \rangle$, y

correlación entre primeros vecinos, como función de la temperatura, en la aproximación de pares de Oguchi, para la fase cristalina.

3. Caso Amorfo en APO

Análogamente a lo hecho en ACM, para el caso amorfo, el promedio de los operadores se calcula tomando primero el promedio térmico estadístico sobre todo el ensamble y luego se toma un segundo promedio, ahora sobre todas las direcciones de los ejes de anisotropía de los iones. Es decir:

$$\sigma \equiv \langle\langle S_z \rangle\rangle, \quad \beta \equiv \langle\langle S_z^2 \rangle\rangle \quad \text{y} \quad \tau \equiv \langle\langle S_{1z} S_{2z} \rangle\rangle \quad (4-17-a)$$

donde

$$\langle\langle \check{O} \rangle\rangle \equiv \int_0^1 d\mu_1 \int_0^1 d\mu_2 \langle \check{O}(\mu_1, \mu_2) \rangle \quad (4-17-b)$$

con:

$$\langle \check{O}(\mu_1, \mu_2) \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \check{O} e^{\frac{\check{H}}{kT}}(\mu_1, \mu_2) \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\frac{\check{H}}{kT}}(\mu_1, \mu_2) \right\}} \quad (4-17-c)$$

y

$$\mu_i = \cos \theta_i \equiv \hat{Z} \cdot \hat{Z}_i \quad (4-17-d)$$

siendo \hat{z}_i el eje anisotropía (de fácil magnetización) del ión-i y \hat{z} el eje externo (definido por la dirección de la magnetización de la muestra.

Al definir el doble promedio en (4-17) se supone que no existe relación entre los ángulos θ_1 y θ_2 , lo que significa que cada uno de los ejes \hat{z}_i es independiente uno de otro. Sin embargo, algunas constricciones químicas del sistema pueden hacer que $\theta_0 \equiv \theta_1 - \theta_2$ tenga un valor fijo, o al menos que su valor esté dentro de un pequeño intervalo.

Se tiene entonces que, para el caso amorfo, el sistema es descrito por el siguiente Hamiltoniano:

$$\check{H}_{APO} = \check{H}_{par}^I + \check{H}_{p-c}^I + \check{H}^A \quad (4-18)$$

donde \check{H}_{par}^I da cuenta de la interacción exacta entre los iones de un par, sus elementos de matriz fueron calculados en (4-3). El término \check{H}_{p-c}^I corresponde a la interacción del par con el resto de los iones del cristal, como sabemos, dicha interacción es tratada mediante una aproximación de campo molecular, por lo tanto, sus elementos de matriz son dados por (4-6), con el cambio de $\langle \dots \rangle$ por $\langle \langle \dots \rangle \rangle$. Finalmente \check{H}^A corresponde a la anisotropía de campo cristalino, la cual es considerada mediante el modelo HPZ, y sus

elementos de matriz se calculan a continuación. Para ello consideremos la siguiente figura:

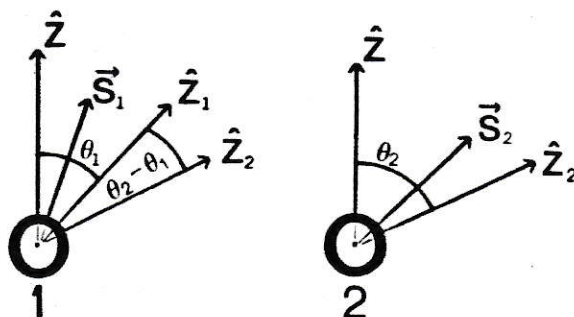


FIGURA 1.

En esta Figura se muestran los diferentes ángulos y ejes involucrados en el cálculo cuando se trabaja con "un racimo 2-spin".

La relación entre las componentes de \vec{S}_1 en los ejes externos (x, y, z) y los ejes locales del ión-1 (x_1, y_1, z_1) es:

$$S_{1x} = S_{1x_1} \cos \theta_1 - S_{1z_1} \sin \theta_1$$

$$S_{1y} = S_{1y_1} \tag{4-19-a}$$

$$S_{1z} = S_{1x_1} \sin \theta_1 + S_{1z_1} \cos \theta_1$$

Análogamente, la relación entre las componentes de \vec{S}_2 en los ejes externos (x, y, z) y los ejes locales del ión-1 (x_1, y_1, z_1) es:

$$S_{2x} = S_{2x_1} \cos \theta_1 - S_{2z_1} \sin \theta_1$$

$$S_{2y} = S_{2y_1} \quad (4-19-b)$$

$$S_{2z} = S_{2x_1} \sin \theta_1 + S_{2z_1} \cos \theta_1$$

Cuando consideramos un "racimo 2-spin" el Hamiltoniano de anisotropía es:

$$\mathcal{H}^A = -D (\check{S}_{1z_1}^2 + \check{S}_{2z_2}^2) \quad (4-20)$$

donde:

$$\check{S}_{1z_1} = -\check{S}_{1x} \sin \theta_1 + \check{S}_{1z} \cos \theta_1 \quad (4-21)$$

$$\check{S}_{2z_2} = -\check{S}_{2x} \sin \theta_2 + \check{S}_{2z} \cos \theta_2$$

Definiendo $\mu_i = \cos \theta_i$ y $\nu_i = \sin \theta_i$; con $i = 1, 2$ y usando que:

$$\check{S}_x = \frac{1}{2} (\check{S}_+ + \check{S}_-)$$

se tiene, luego de un poco de álgebra:

$$\check{S}_{1z_1}^2 = \frac{1}{4} \nu_1^2 (\check{S}_{1+}^2 + \check{S}_{1-}^2 + \check{S}_{1+} \check{S}_{1-} + \check{S}_{1-} \check{S}_{1+}) + \mu_1^2 \check{S}_{1z}^2$$

$$- \frac{1}{2} \mu_1 \nu_1 (\check{S}_{1+} \check{S}_{1z} + \check{S}_{1z} \check{S}_{1+} + \check{S}_{1-} \check{S}_{1z} + \check{S}_{1z} \check{S}_{1-})$$

(4-22-a)

junto con:

$$\check{S}_{2z}^2 = \frac{1}{4} \nu_2^2 (\check{S}_{2+}^2 + \check{S}_{2-}^2 + \check{S}_{2+} \check{S}_{2-} + \check{S}_{2-} \check{S}_{2+}) + \mu_2^2 \check{S}_{2z}^2$$

(4-22-b)

$$- \frac{1}{2} \mu_2 \nu_2 (\check{S}_{2+} \check{S}_{2z} + \check{S}_{2z} \check{S}_{2+} + \check{S}_{2-} \check{S}_{2z} + \check{S}_{2z} \check{S}_{2-})$$

con esto es posible calcular los elementos de \check{H}^A pues, como sabemos:

$$\check{H}^A |SM\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle S_1 S_2 m_1 m_2 | SM \rangle \check{H}^A |S_1 S_2 m_1 m_2\rangle \quad (4-23)$$

Luego de un largo y tedioso cálculo, que figura en el Apéndice # 4, se tiene que los elementos de matriz del Hamiltoniano de anisotropía son:

$$\langle 22 | H^A | 22 \rangle = (D/2) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 - 4)$$

$$\langle 22 | H^A | 21 \rangle = (D/4) \{ \sin(2\theta_1) + \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 22 | H^A | 20 \rangle = -(D\sqrt{6}/12) \{ \sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 \}$$

$$\langle 22 | H^A | 2-1 \rangle = 0$$

$$\langle 22 | H^A | 2-2 \rangle = 0$$

$$\langle 22 | H^A | 11 \rangle = (-D/4) \{ \sin(2\theta_1) - \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 22 | H^A | 10 \rangle = (D\sqrt{2}/4) \{ \sin^2 \theta_1 - \sin^2 \theta_2 \}$$

$$\langle 22 | H^A | 1-1 \rangle = 0$$

$$\langle 22 | H^A | 00 \rangle = -(D\sqrt{3}/6) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2)$$

$$\langle 21 | H^A | 21 \rangle = -(D/4) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 + 4)$$

$$\langle 21 | H^A | 20 \rangle = (D\sqrt{6}/24) \{ \sin(2\theta_1) + \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 21 | H^A | 2-1 \rangle = -(D/4) \{ \sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 \}$$

$$\langle 21 | H^A | 2-2 \rangle = 0$$

$$\langle 21 | H^A | 11 \rangle = (3D/4) (\sin^2 \theta_1 - \sin^2 \theta_2)$$

$$\langle 21 | H^A | 10 \rangle = (D\sqrt{2}/8) \{ \sin(2\theta_1) - \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 21 | H^A | 1-1 \rangle = (D/4) (\sin^2 \theta_1 - \sin^2 \theta_2)$$

$$\langle 21 | H^A | 00 \rangle = -(D\sqrt{3}/6) \{ \sin(2\theta_1) + \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 20 | H^A | 20 \rangle = -(D/6) (3 \sin^2 \theta_1 + 3 \sin^2 \theta_2 + 4)$$

$$\langle 20 | H^A | 2-1 \rangle = -(D\sqrt{6}/24) \{ \sin(2\theta_1) + \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 20 | H^A | 2-2 \rangle = -(D\sqrt{6}/12) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2)$$

$$\langle 20 | \hat{H}^A | 11 \rangle = (D\sqrt{6}/8) \{ \sin(2\theta_1) - \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 20 | \hat{H}^A | 10 \rangle = 0$$

$$\langle 20 | \hat{H}^A | 1-1 \rangle = (D\sqrt{6}/8) \{ \sin(2\theta_1) - \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 20 | \hat{H}^A | 00 \rangle = (D\sqrt{2}/6) (3 \sin^2 \theta_1 + 3 \sin^2 \theta_2 - 4)$$

$$\langle 2-1 | \hat{H}^A | 2-1 \rangle = -(D/4) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 + 4)$$

$$\langle 2-1 | \hat{H}^A | 2-2 \rangle = -(D/4) \{ \sin(2\theta_1) + \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 2-1 | \hat{H}^A | 11 \rangle = -(D/4) (\sin^2 \theta_1 - \sin^2 \theta_2)$$

$$\langle 2-1 | \hat{H}^A | 10 \rangle = (D\sqrt{2}/8) \{ \sin(2\theta_1) - \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 2-1 | \hat{H}^A | 1-1 \rangle = -(3D/4) (\sin^2 \theta_1 - \sin^2 \theta_2)$$

$$\langle 2-1 | \hat{H}^A | 00 \rangle = (D\sqrt{3}/6) \{ \sin(2\theta_1) + \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 2-2 | \hat{H}^A | 2-2 \rangle = (D/2) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 - 4)$$

$$\langle 2-2 | \hat{H}^A | 11 \rangle = 0$$

$$\langle 2-2 | \hat{H}^A | 10 \rangle = -(D\sqrt{2}/4) \{ \sin^2 \theta_1 - \sin^2 \theta_2 \}$$

$$\langle 2-2 | \hat{H}^A | 1-1 \rangle = -(D/4) \{ \sin(2\theta_1) - \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 2-2 | \hat{H}^A | 00 \rangle = -(D\sqrt{3}/6) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2)$$

$$\langle 11 | \hat{H}^A | 11 \rangle = -(D/4) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 + 4)$$

$$\langle 11 | \hat{H}^A | 10 \rangle = -(D\sqrt{2}/8) \{ \sin(2\theta_1) + \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 11 | \hat{H}^A | 1-1 \rangle = (D/4) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2)$$

$$\langle 11 | \hat{H}^A | 00 \rangle = 0$$

$$\langle 10 | \hat{H}^A | 10 \rangle = (D/2) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 - 4)$$

$$\langle 10 | \hat{H} | 1-1 \rangle = (D\sqrt{2}/8) \{ \sin(2\theta_1) + \sin(2\theta_2) \}$$

$$\langle 10 | \hat{H} | 00 \rangle = 0$$

$$\langle 1-1 | \hat{H} | 1-1 \rangle = -(D/4) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2 + 4)$$

$$\langle 1-1 | \hat{H} | 00 \rangle = 0$$

$$\langle 00 | \hat{H} | 00 \rangle = -4D/3$$

Tal como sucede en el caso cristalino, el Hamiltoniano completo, para el sistema amorfo, no es diagonal en la base $\{|SM\rangle\}$. Por lo tanto, debe ser diagonalizado para conocer sus autovalores E_i y sus autovectores $|i\rangle$. De (4-3), (4-6) y (4-24) vemos que

$$E_i = E_i(\sigma, \beta, \tau, \mu_1, \mu_2) \quad (4-25)$$

por lo tanto:

$$\sigma = \int_0^1 d\mu_1 \int_0^1 d\mu_2 \left\{ \frac{\sum_i \langle i | S_z | i \rangle e^{-\frac{E_i}{kT}(\sigma, \beta, \tau, \mu_1, \mu_2)}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}(\sigma, \beta, \tau, \mu_1, \mu_2)}} \right\} \quad (4-26-a)$$

$$\beta = \int_0^1 d\mu_1 \int_0^1 d\mu_2 \left\{ \frac{\sum_i \langle i | S_z^2 | i \rangle e^{-\frac{E_i}{kT}(\sigma, \beta, \tau, \mu_1, \mu_2)}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}(\sigma, \beta, \tau, \mu_1, \mu_2)}} \right\} \quad (4-26-b)$$

$$\tau = \int_0^1 d\mu_1 \int_0^1 d\mu_2 \left\{ \frac{\sum_i \langle i | S_{1z} S_{2z} | i \rangle e^{-\frac{E_i}{kT}(\sigma, \beta, \tau, \mu_1, \mu_2)}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}(\sigma, \beta, \tau, \mu_1, \mu_2)}} \right\}$$

(4-26-c)

constituyen un trío de ecuaciones autoconsistentes acopladas, que deben resolverse simultáneamente, para conocer σ, β y τ como función de la temperatura, luego de fijar los parámetros α, J y D .

Este método representa un mejoramiento de la aproximación de campo molecular, pues la interacción de pares es tratada exactamente, con lo cual se consideran ciertas propiedades de las interacciones $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)$ y $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2$. Sin embargo, retiene algunas de sus deficiencias debido a que también reemplaza las interacciones con el resto del cristal por campos proporcionales a los promedios de los operadores de spin. El considerar campos más generales, es decir que no sean proporcionales a los valores medios de los operadores de spin del resto de los iones del cristal, puede proporcionar una mejor descripción del ferromagnetismo. Por esto en el próximo capítulo usaremos la llamada "aproximación de acoplamiento constante".

V. APROXIMACION DE ACOPLAMIENTO CONSTANTE

La aproximación de campo molecular reemplaza la interacción de un ión magnético con el resto del cristal por un campo efectivo, que se toma proporcional a la magnetización. Esto significa reemplazar todos los operadores del spin, de los otros iones, que aparecen en el Hamiltoniano, por sus valores promedio. Puesto que el ión magnético es escogido al azar, el valor promedio de sus operadores de spin es igual al valor promedio de los operadores de spin de cualquier otro ión del sistema. Por lo tanto, lo que se tiene, finalmente, son ecuaciones de autoconsistencia para los valores promedio de los operadores.

Por otro lado, la aproximación de pares de Oguchi, resuelve en forma exacta la interacción entre dos iones magnéticos, y la interacción de ese par con el resto es tratada mediante una aproximación de campo molecular. El par es escogido al azar, por lo tanto todas sus propiedades son iguales a las de cualquier otro par del sistema, de modo que también se tiene, finalmente, ecuaciones de autoconsistencia.

Esta forma de trabajar no garantiza la completa consistencia de la teoría resultante (20), y sus defectos han

sido analizados por Kasteleijn y van Kranendank (18).

La aproximación de acoplamiento constante (CCA) consiste en reemplazar las interacciones, del "racimo" con el resto del cristal, por un campo efectivo que, en principio, es una función arbitraria de la magnetización y de la temperatura. Las características de ese campo son determinadas, posteriormente, imponiendo alguna condición de autoconsistencia que sea físicamente plausible.

1. Intercambio bicuadrático en CCA

Tradicionalmente, la forma de usar CCA en un Hamiltoniano que contiene términos de interacción bicuadrática, en la aproximación de "racimo 1-spin" es la presentada por H.A. Brown (21) y fue la utilizada en (12) y (22); y consiste en considerar el Hamiltoniano de intercambio $\check{\mathcal{H}}_1^I$ como:

$$\check{\mathcal{H}}_1^I = - g\mu_B H \check{S}_z \quad (5-1)$$

donde g es el factor giromagnético de Landé, μ_B el magnetón de Bohr y H el campo efectivo (el campo externo se considera nulo para estudiar la magnetización espontánea). En (5-1) toda la "influencia" del término bicuadrático es considerada "implícita" en el campo efectivo.

Lo que se sugiere es usar un Hamiltoniano donde la interacción bicuadrática sea considerada en forma "explícita" en los campos efectivos (22). Para ello se sigue un camino análogo al de la aproximación del campo molecular, pero reemplazando $\langle S_z \rangle$ por H_σ , $\langle S_z^2 \rangle$ por H_β , de modo que el Hamiltoniano, para iones de spin=1, con interacción sólo a z primeros vecinos, es:

$$\check{\mathcal{H}}_1 = -z \int \{ (2-\alpha) H_\sigma \check{S}_z + 2\alpha [2-H_\beta] + \alpha [3H_\beta - 2] \check{S}_z^2 \} \quad (5-2)$$

Ahora consideremos un "racimo 2-spin", en el cual la interacción entre los dos iones es resuelta en forma exacta y la del par con el resto del cristal mediante una aproximación tipo campo molecular. Razonando en forma análoga a como se hizo en la aproximación de pares de Oguchi y reemplazando $\langle S_z \rangle$ por H_σ , $\langle S_z^2 \rangle$ por H_β y $\langle S_{1z} S_{2z} \rangle$ por H_τ , el Hamiltoniano para el par de iones de spin=1, con interacción sólo con los z primeros vecinos es:

$$\begin{aligned} \check{\mathcal{H}}_2 = & 4 \int (1-2\alpha) + (4\alpha - 1) \int \check{S}^2 - \frac{1}{2} \alpha \int \check{S}^2 \check{S}^2 \\ & - (z-1) \int \{ (2-\alpha) \left(\frac{1}{2}\right) H_\sigma \check{S}_z + \alpha \left[2 - \frac{1}{2} H_\beta + H_\tau \right] \check{S}^2 \\ & + \alpha \left[\left(\frac{3}{2}\right) H_\beta - 3 H_\tau - 2 \right] \check{S}_z^2 \} \end{aligned} \quad (5-3)$$

El problema, ahora, es encontrar alguna condición que permita determinar los campos efectivos H_α , H_β y H_τ . Como se dijo anteriormente, la forma tradicional de usar CCA es incluyendo la interacción bicuadrática en forma "implícita" en el campo efectivo; por lo tanto, se tiene sólo un campo, el cual es determinado igualando la magnetización reducida calculada para un "racimo 1-spin" en la calculada para un "racimo 2-spin" (12, 21, 22).

En nuestro caso se tienen tres campos efectivos, por lo que se necesitan tres ecuaciones para poder evaluarlos. Lo que sugerimos en este trabajo es extender el razonamiento empleado habitualmente, y además de igualar las magnetizaciones reducidas igualar el valor de $\langle S_z^2 \rangle$ obtenido mediante (5-2) con el obtenido mediante (5-3), debidamente normalizado. La tercera condición se obtiene repitiendo el procedimiento anterior para $\langle S_{1z} S_{2z} \rangle$.

Más específicamente, denotemos por $\langle \dots \rangle_1$ los promedios calculados con (5-2) y por $\langle \dots \rangle_2$ los calculados en (5-3); i.e. para un operador \check{O} cualquiera:

$$\langle \check{O} \rangle_1 = \frac{\text{Tr} \left\{ \check{O} e^{-\frac{\check{H}_1}{kT}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\frac{\check{H}_1}{kT}} \right\}} \quad (5-4-a)$$

$$\langle \check{O} \rangle_2 = \frac{\text{Tr} \left\{ \check{O} e^{-\frac{\check{X}_2}{kT}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\frac{\check{X}_2}{kT}} \right\}} \quad (5-4-b)$$

entonces imponiendo que:

$$i) \quad \sigma_1(T) = \sigma_2(T) \Rightarrow \langle S_z \rangle_1 = \left(\frac{1}{2}\right) \langle S_z \rangle_2 \quad (5-5-a)$$

$$ii) \quad \beta_1(T) = \beta_2(T) \Rightarrow \langle S_z^2 \rangle_1 = \left(\frac{1}{4}\right) \langle S_z^2 \rangle_2 \quad (5-5-b)$$

$$iii) \quad \tau_1(T) = \tau_2(T) \Rightarrow \langle S_z \rangle_1^2 = \langle S_{1z} S_{2z} \rangle_2 \quad (5-5-c)$$

se tienen tres ecuaciones de autoconsistencia que, en principio, permiten determinar los tres campos efectivos involucrados en el cálculo. Conociendo los campos efectivos se conocen también los autovalores del Hamiltoniano (5-3), con dichos autovalores se evalúa la función partición del sistema, y con ella se obtienen todas las funciones termodinámicas de interés.

2. Anisotropía en CCA (Caso cristalino).

La anisotropía de campo cristalino es tratada, en CCA, agregando:

$$\check{\mathcal{H}}_1^A = -D \check{S}_z^2 \quad (5-6)$$

al Hamiltoniano para "racimo 1-spin" (5-2), los elementos de matriz de (5-6) se determinan en forma idéntica a como se hizo en la aproximación de campo molecular (Capítulo III). Además, se agrega el término:

$$\check{\mathcal{H}}_2^A = -D (\check{S}_{1z}^2 + \check{S}_{2z}^2) \quad (5-7)$$

al Hamiltoniano para "racimo 2-spin" (5-3) y sus elementos de matriz se calculan tal como se calcularon en la aproximación de pares de Oguchi (Capítulo IV). La inclusión del término de anisotropía sólo modifica los elementos de matriz de los Hamiltonianos y por tanto sus autovalores y autovectores, pero no altera las condiciones de autoconsistencia (5-5-a), (5-5-b) y (5-5-c), las cuales pueden seguir usándose para determinar los campos efectivos y, como se dijo anteriormente, luego de conocidos los campos es posible conocer toda las propiedades termodinámicas del sistema.

3. Caso amorfo en CCA

Para pasar del caso cristalino al caso amorfo se utiliza la misma técnica de los capítulos anteriores. Es decir, se reemplaza $\langle \dots \rangle_i$ por $\langle \langle \dots \rangle \rangle_i$, con $i=1,2$ según corresponda a "racimo 1-spin" o a "racimo 2-spin".

Los Hamiltonianos de anisotropía son:

$$\check{H}_1^A = -D \check{S}_{1z_1}^2 \quad (5-8)$$

y

$$\check{H}_2^A = -D (\check{S}_{1z_1}^2 + \check{S}_{2z_2}^2) \quad (5-9)$$

para "racimo 1-spin" y "racimo 2-spin" respectivamente. Los elementos de matriz de ambos fueron calculados, explícitamente, en los capítulos anteriores (Capítulo III y Capítulo IV).

Por lo tanto, para el caso amorfo en CCA, las ecuaciones de autoconsistencia son:

$$i) \quad \sigma_1(T) = \sigma_2(T) \quad \Rightarrow \langle \langle S_z \rangle \rangle_1 = \frac{1}{2} \langle \langle S_z \rangle \rangle_2 \quad (5-10-a)$$

$$ii) \quad \beta_1(T) = \beta_2(T) \quad \Rightarrow \langle \langle S_z^2 \rangle \rangle_1 = \frac{1}{4} \langle \langle S_z^2 \rangle \rangle_2 \quad (5-10-b)$$

$$\text{iii) } \tau_1(T) = \tau_2(T) \Rightarrow \langle\langle S_z \rangle\rangle_1^2 = \langle\langle S_{1z} S_{2z} \rangle\rangle_2 \quad (5-10-c)$$

con ellas determinamos los campos H_σ , H_β , H_τ y con ellos estamos en condiciones de calcular toda la termodinámica del sistema. Las similitudes y diferencias entre el comportamiento del sistema en sus fases cristalina y amorfa se obtienen comparando los resultados obtenidos mediante (5-5) con los obtenidos usando (5-10).

VI. RESULTADOS NUMERICOS

1. Aproximación de Campo Molecular.

Por comodidad se mostrarán primero los resultados obtenidos usando la aproximación de campo molecular, tanto en la fase cristalina como amorfa.

Las ecuaciones de autoconsistencia (3-13) y (3-24) fueron resueltas numéricamente, para ello se utilizaron dos programas que figuran en el Apéndice computacional (uno para el caso cristalino y el otro para el caso amorfo). Todo el cálculo se hizo para $f=1$, $z=8$ vecinos y $0 \leq \alpha \leq 1$.

Lo primero que se observa es que el sistema presenta, en ambas fases, una magnetización neta en ausencia de campo externo, para temperaturas que esté por debajo de cierta temperatura crítica (gráficos 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7).

En esos gráficos se puede apreciar que en la fase cristalina se tiene una saturación completa de la magnetización a temperatura cero (i.e. $\sigma_{\text{cris}}(T=0)=1$), para todo valor de D . Sin embargo, no sucede lo mismo para la fase amorfa,

donde se observa una no saturación de la magnetización del sistema. Esta no saturación es mayor a medida que aumenta D (para un valor de α fijo) y es más notoria para mayores valores de α . En la tabla que aparece a continuación se muestran los valores de $\sigma_{AM}(T=0)$, para diferentes valores de α y D .

		$\alpha =$				
		0	.25	.5	.75	1.
$D =$	0.	1.	1.	1.	1.	1.
	4.	.9924	.9913	.9895	.9865	.9811
	10.	.9585	.9523	.9428	.9273	.8992

Este comportamiento de la magnetización a temperatura cero está en completo acuerdo con el mostrado por otros autores (5).

La explicación estaría basada en que el eje de anisotropía del ión magnético está orientado al azar (todas las direcciones son igualmente probables). Esto significa que, aún a temperatura nula, no todos los spines están orientados paralelamente unos respecto a otros. Por otro lado, al aumentar α , el término bicuadrático favorece, en términos de la estadística de Boltzmann, la aparición de estados, de

pares, cuya componente z del spin sea antiparalela, por lo tanto esta no saturación es más notoria.

Otro resultado importante es el comportamiento de la temperatura crítica como función de D (Gráfico 8). En el caso cristalino la temperatura crítica, inicialmente aumenta al aumentar D para finalmente, hacerse constante cuando D es suficientemente grande. Sin embargo, en el caso amorfo la situación es diferente, la temperatura crítica disminuye al aumentar D , aunque finalmente también se hace constante para valores de D grandes. Por su parte el parámetro α disminuye la temperatura crítica (para cualquier valor de D) tanto en el caso cristalino como amorfo (Gráfico 8). Este comportamiento de las temperaturas críticas es fácil de explicar considerando que el ión, aislado, tiene tres autovalores de energía (correspondientes a $|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle$) y la separación entre los niveles es proporcional a D , por lo tanto para D pequeños, es posible que aumentos de la temperatura produzcan transiciones entre estados, pero cuando D es muy grande la separación entre los niveles es tan grande que resulta imposible obtener transiciones entre los estados, por lo que T_c debe converger cuando D se hace infinito. El mismo argumento empleado para justificar la no saturación de la magnetización reducida a temperatura nula, sirve para explicar el que un aumento en el parámetro de anisotropía se

traduzca en una disminución de la temperatura crítica, como se observa en el caso amorfo. En el caso cristalino la anisotropía favorece la orientación, del spin, a lo largo del eje z , por lo que la temperatura crítica aumenta con D .

Es interesante, además, notar que en el caso cristalino, cuando $D=0$, se tiene $\langle S_z^2 \rangle = 2/3$ para $T > T_c$. Cuando $D > 0$ la situación es diferente pues $\langle S_z^2 \rangle > 2/3$ para $T > T_c$; i.e. existe un "ordenamiento cuadrupolar" que se mantiene para temperaturas mayores que la temperatura crítica. Nótese que el parámetro $Q = (3 \langle S_z^2 \rangle - 2)$ se ha definido de modo que $Q=1$ si $\langle S_z^2 \rangle = 1$ y $Q=0$ cuando $\langle S_z^2 \rangle = 2/3$. En el caso amorfo se tiene $\langle \langle S_z^2 \rangle \rangle = 2/3$ cuando $T > T_c$ para todo valor de D . Una detallada discusión acerca de la aparición de un ordenamiento cuadrupolar en la fase cristalina se encuentra en (23).

Finalmente en los Gráficos 9 y 10 se comparan las temperaturas críticas, para el caso cristalino, obtenidas mediante ACM con las obtenidas usando la aproximación de acoplamiento constante con interacción bicuadrática implícita, que es la forma tradicional de usar esa aproximación (y son los que se muestran en (12) y (22)). Se puede apreciar que las curvas tienen el mismo comportamiento cualitativo, aunque las predichas por ACM son siempre mayores. Esto parecería

indicar que aún con la aproximación de considerar la interacción bicuadrática en forma implícita, la CCA resulta ser una teoría más conveniente de usar que la ACM.

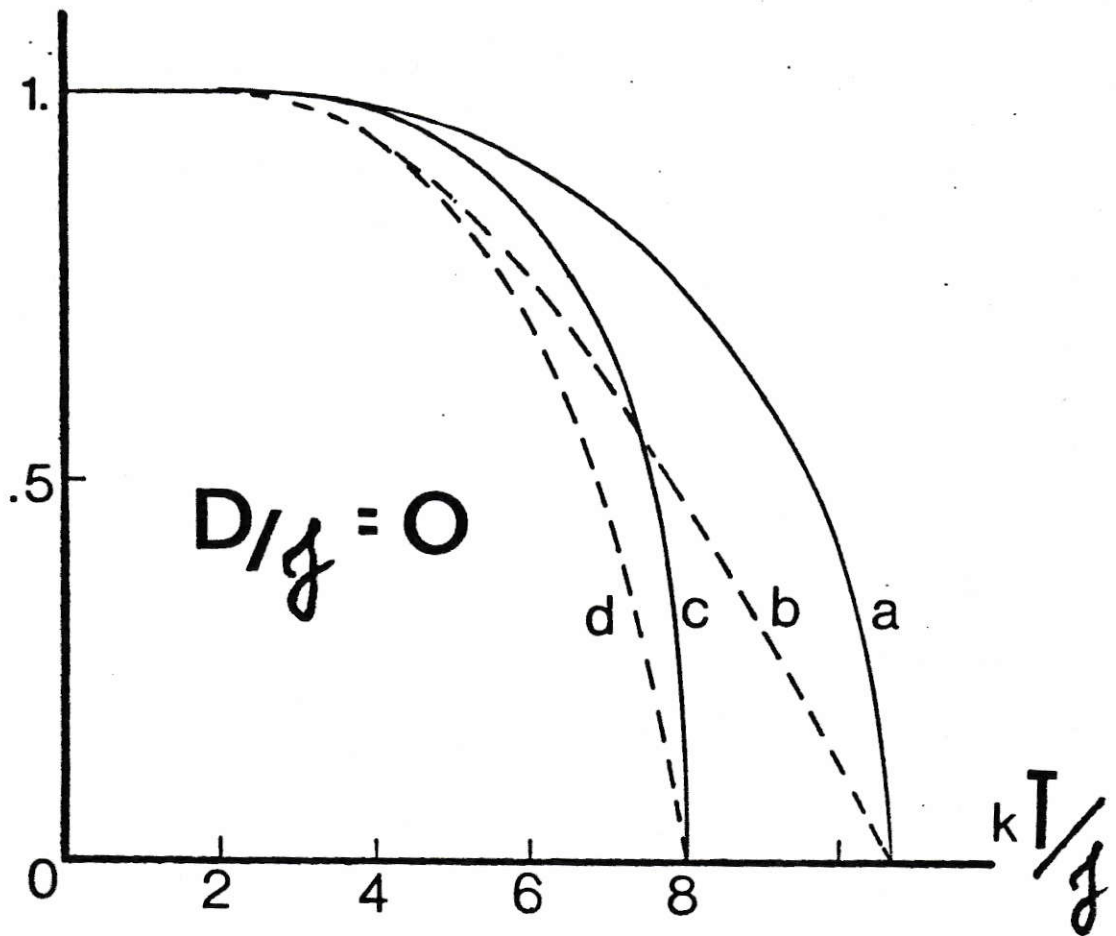


GRAFICO 1. ACM, cristalino. $\sigma = \langle S_z \rangle$, $Q = 3\langle S_z^2 \rangle - 2$
 curva a: $\sigma, \alpha = 0$; curva b: $Q, \alpha = 0$;
 curva c: $\sigma, \alpha = .5$; curva d: $Q, \alpha = .5$

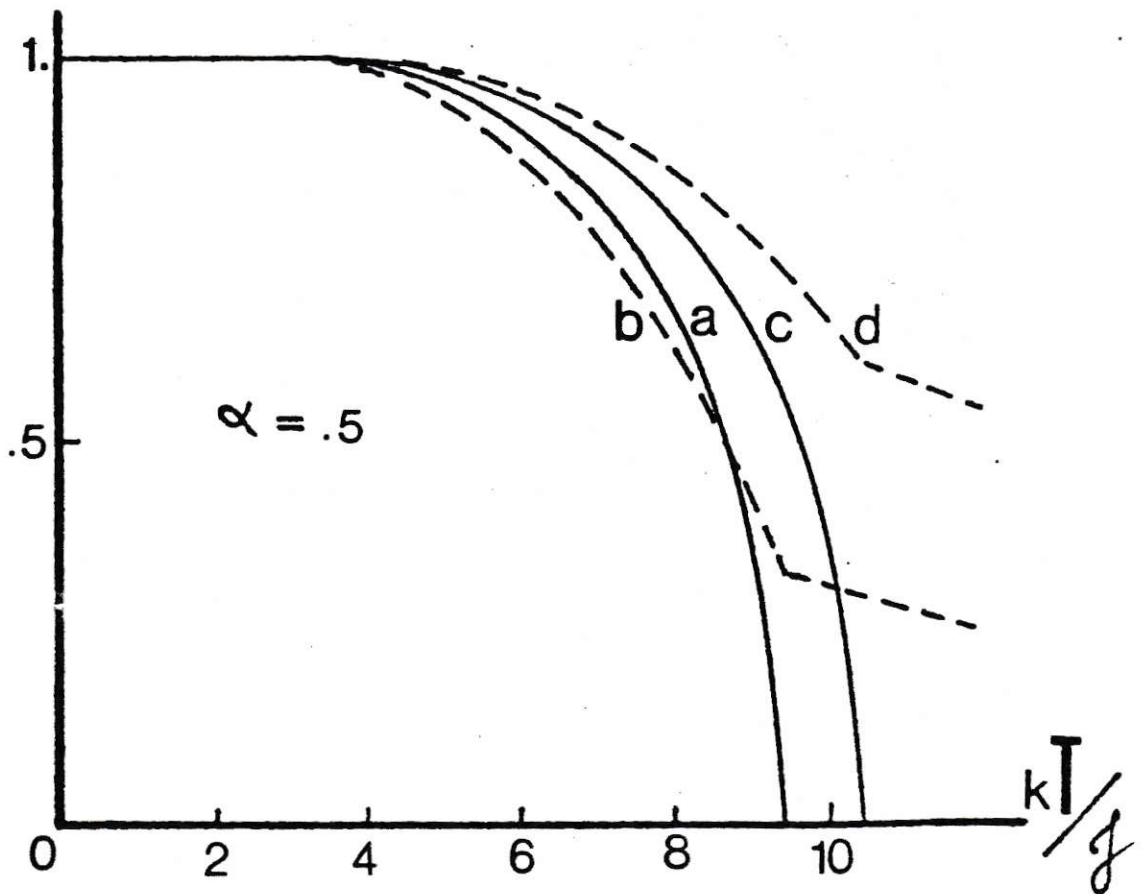


GRAFICO 2. ACM, cristalino. $\sigma = \langle S_z \rangle$, $Q = 3\langle S_z^2 \rangle - 2$,
 $\bar{d} = D/g$; curva a: $\sigma, \bar{d} = 4$; curva b: $Q, \bar{d} = 4$;
 curva c: $\sigma, \bar{d} = 10$; curva d: $Q, \bar{d} = 10$.

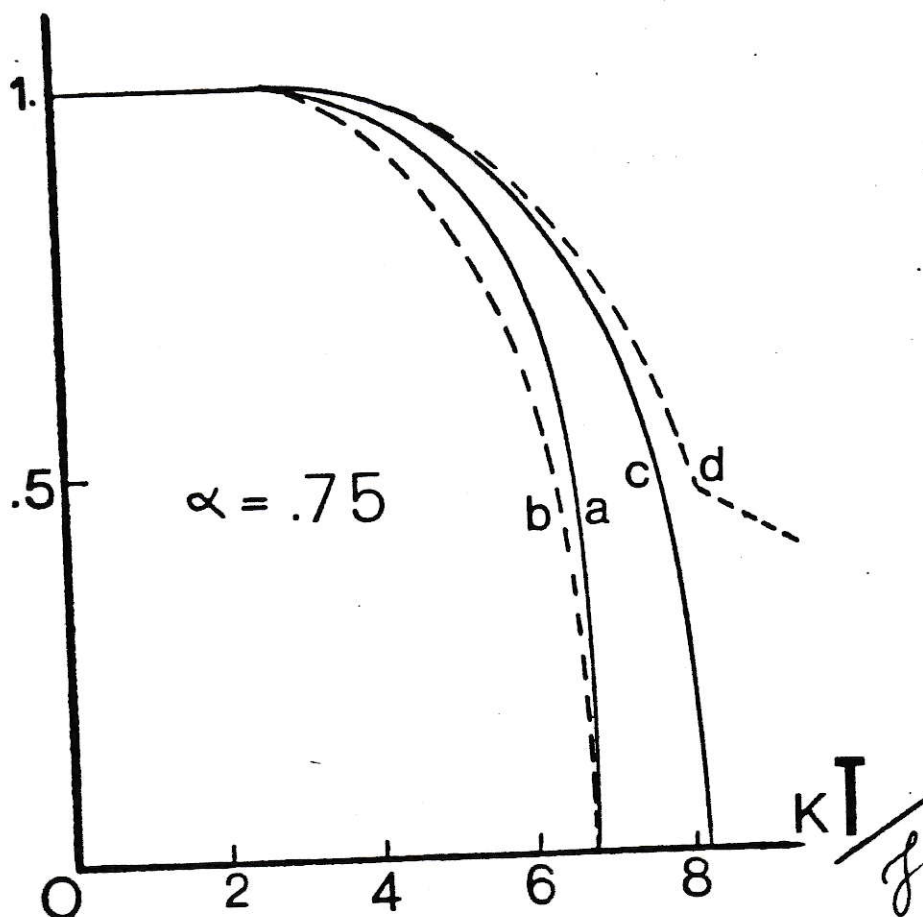


GRAFICO 3. ACM, cristalino. $\sigma = \langle S_z \rangle$, $Q = 3\langle S_z^2 \rangle - 2$,
 $d = D/f$; curva a: $\sigma, d = 0$; curva b: $Q, d = 0$;
 curva c: $\sigma, d = 4$; curva d: $Q, d = 4$.

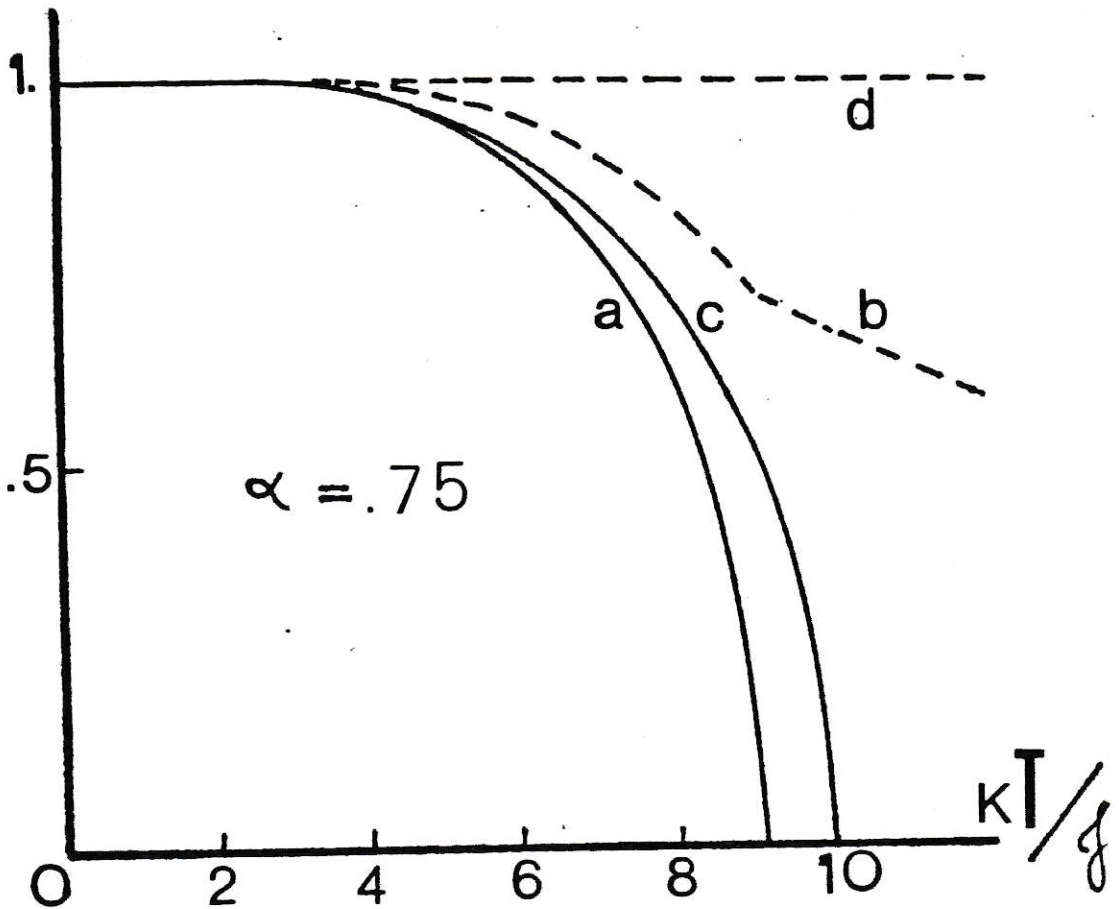


GRAFICO 4. ACM, cristalino. $\sigma = \langle S_z \rangle$, $Q = 3\langle S_z^2 \rangle - 2$
 $d = D/f$; curva a: $\sigma, d = 10$; curva b: $Q, d = 10$;
 curva c: $\sigma, d = 100$; curva d: $Q, d = 100$.

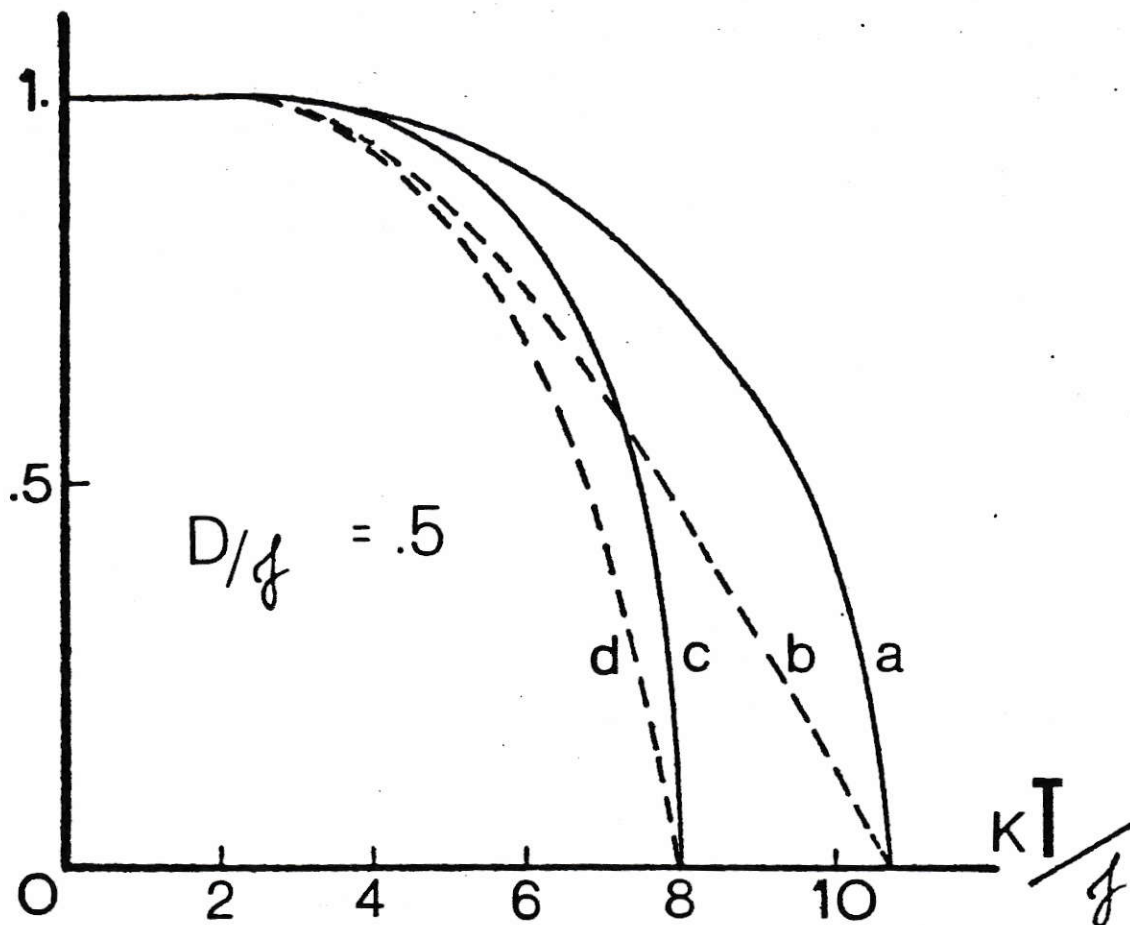


GRAFICO 5. ACM, amorfo. $\sigma = \langle\langle S_z \rangle\rangle$, $Q = 3\langle\langle S_z^2 \rangle\rangle - 2$

curva a: $\sigma, \alpha = 0$; curva b: $Q, \alpha = 0$;

curva c: $\sigma, \alpha = .5$; curva d: $Q, \alpha = .5$

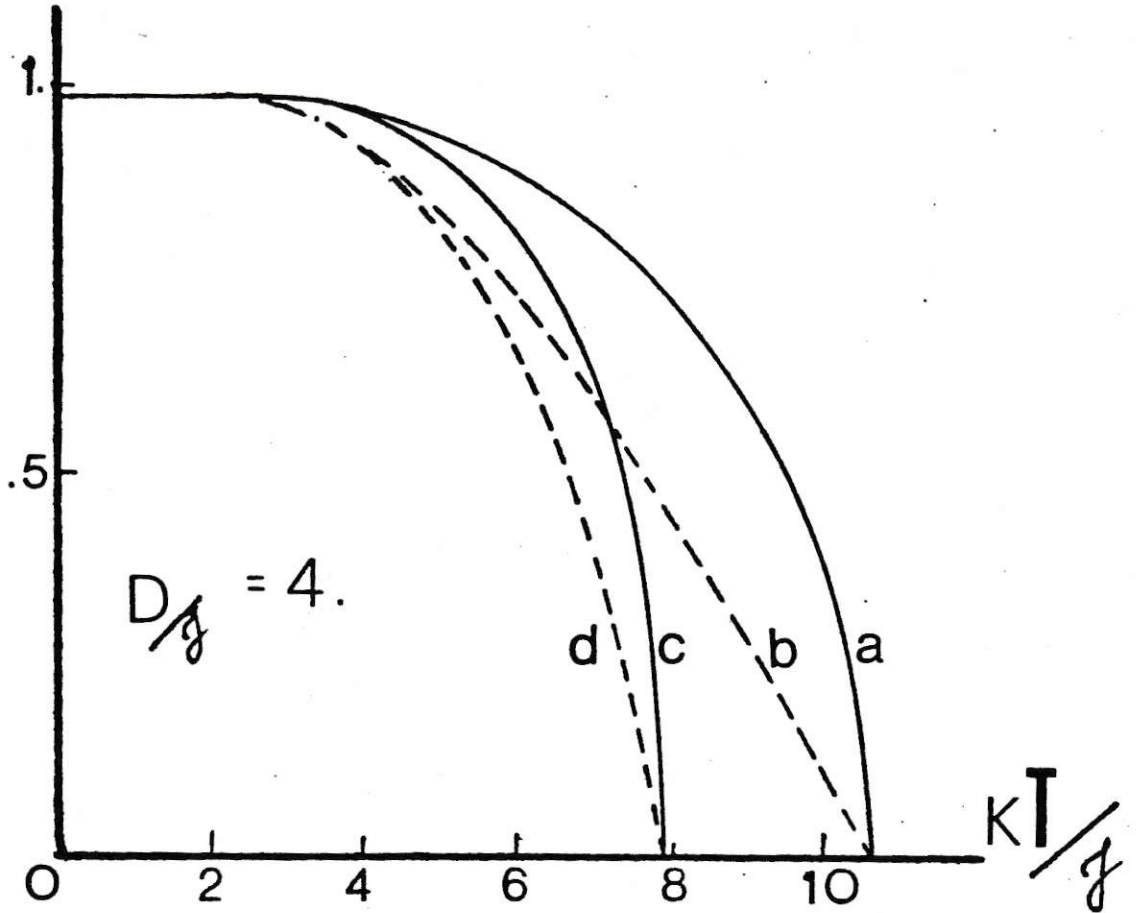


GRAFICO 6. ACM, amorfo. $\sigma = \langle\langle S_z \rangle\rangle$, $Q = 3\langle\langle S_z^2 \rangle\rangle - 2$

curva a: σ , $\alpha = 0$, curva b: Q , $\alpha = 0$;

curva c: σ , $\alpha = .5$; curva d: Q , $\alpha = .5$

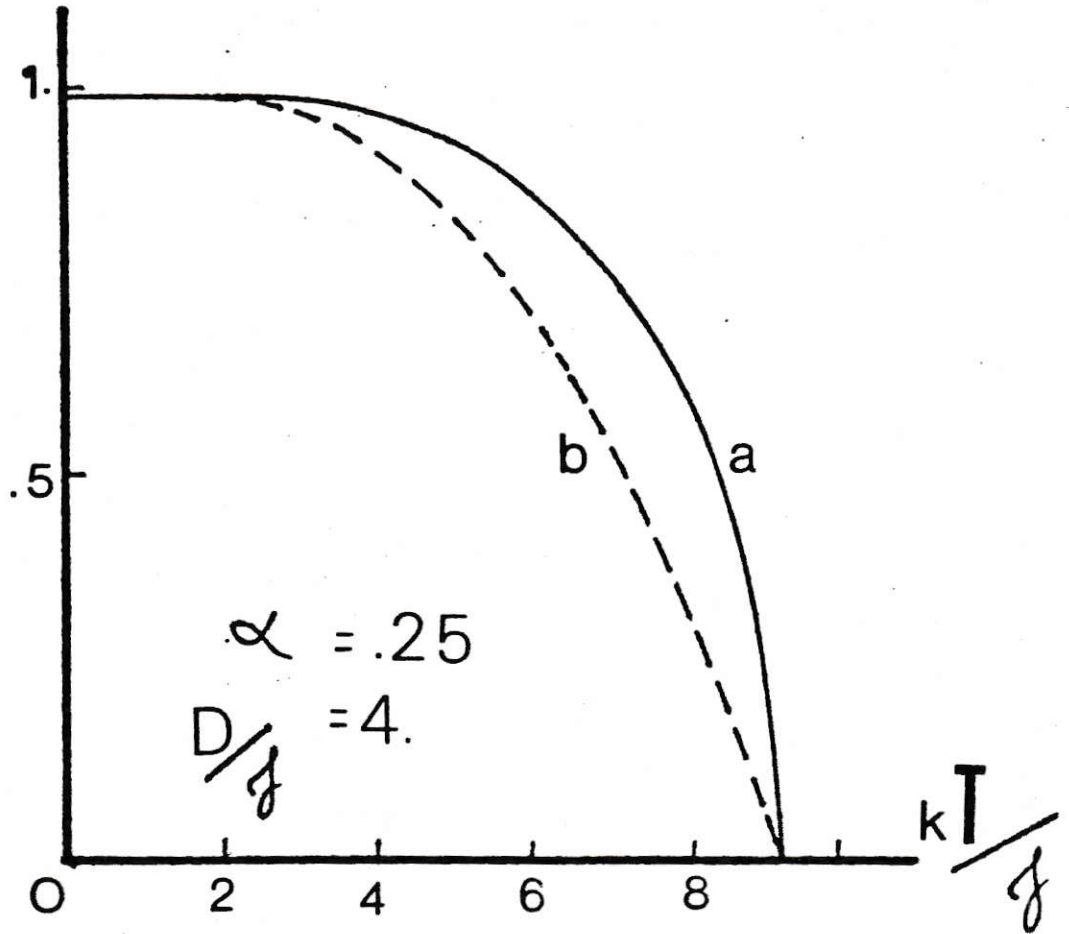


GRAFICO 7. ACM, amorfo. $\sigma = \langle\langle S_z \rangle\rangle$, $Q = 3\langle\langle S_z^2 \rangle\rangle - 2$
 curva a: σ ; curva b: Q . Ambas para $\alpha = .25$
 y $d = 4$.

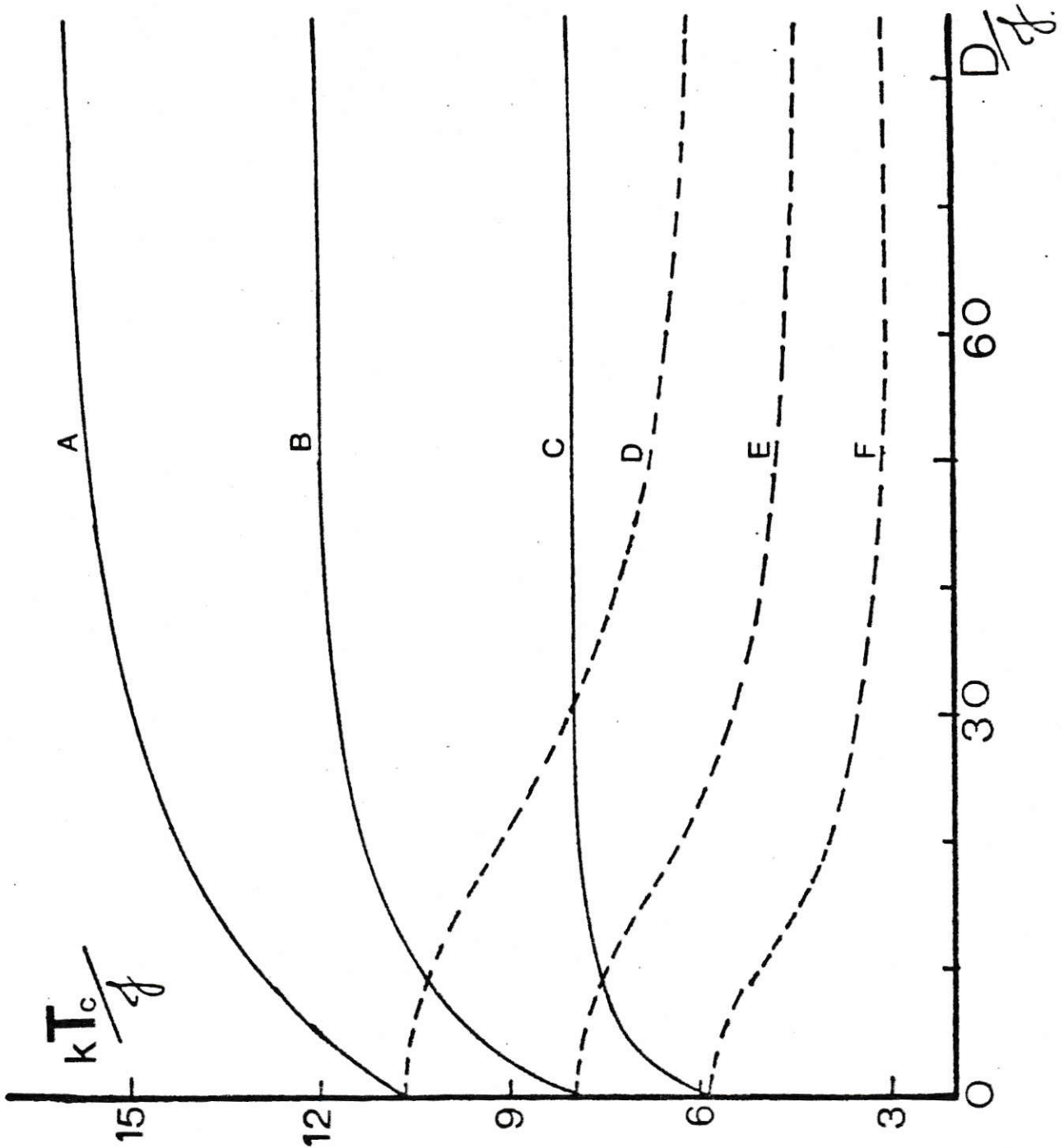


GRAFICO 8. ACM. Temperaturas críticas v/s D . Cristalino amorfo.
 Cristalino: curva A: $\alpha = 0$; curva B: $\alpha = .5$; curva C:
 $\alpha = 1$. Amorfo: curva D: $\alpha = 0$; curva E: $\alpha = .5$;
 curva F: $\alpha = 1$.

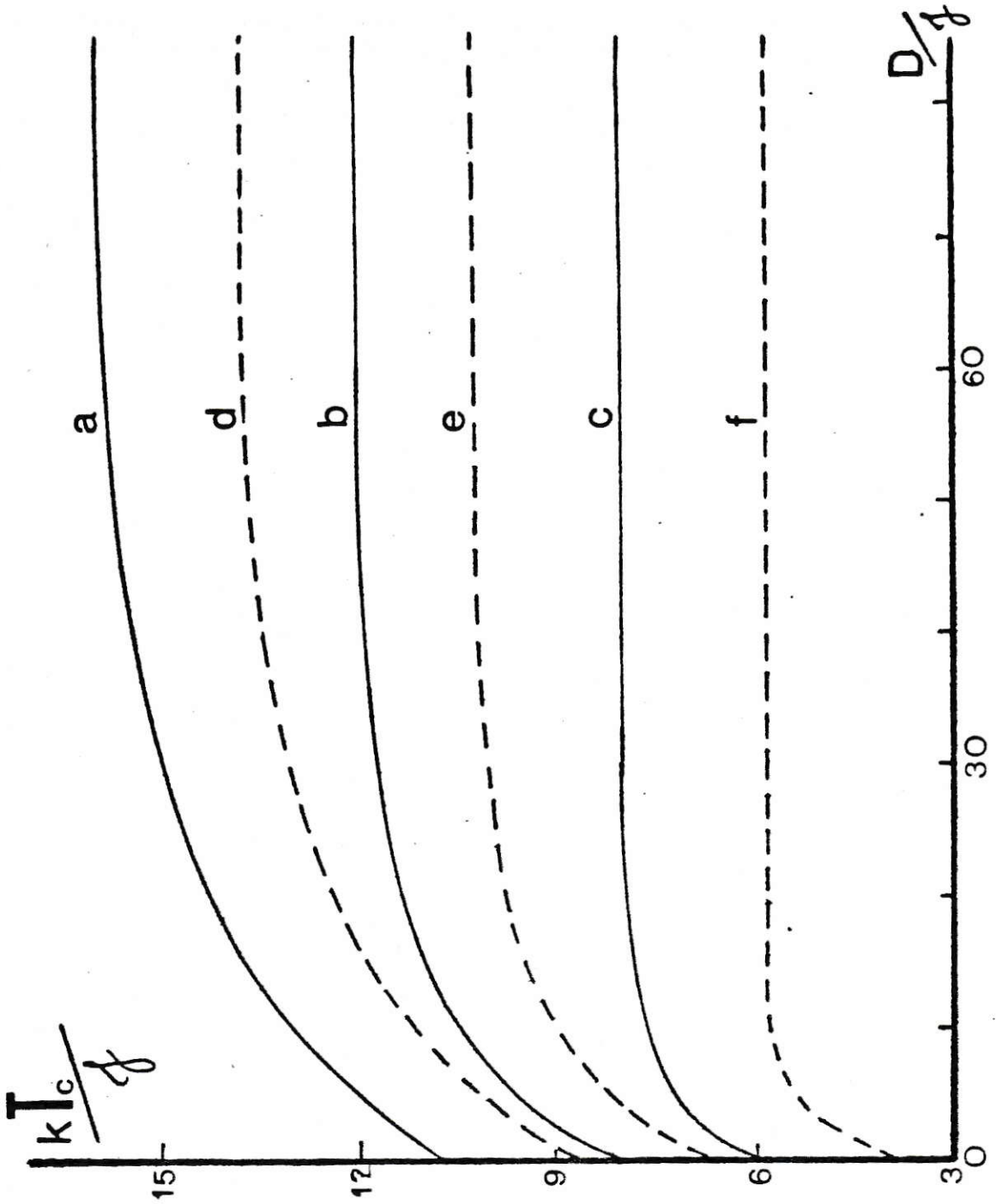


GRAFICO 9. Temperatura crítica v/s D. cristalino.
 Comparación entre ACM (línea llena) y refs. 12,
 22 (línea punteada). curvas a, d: $\alpha = 0$.
 curvas b, e: $\alpha = .5$; curvas c, f: $\alpha = 1$.

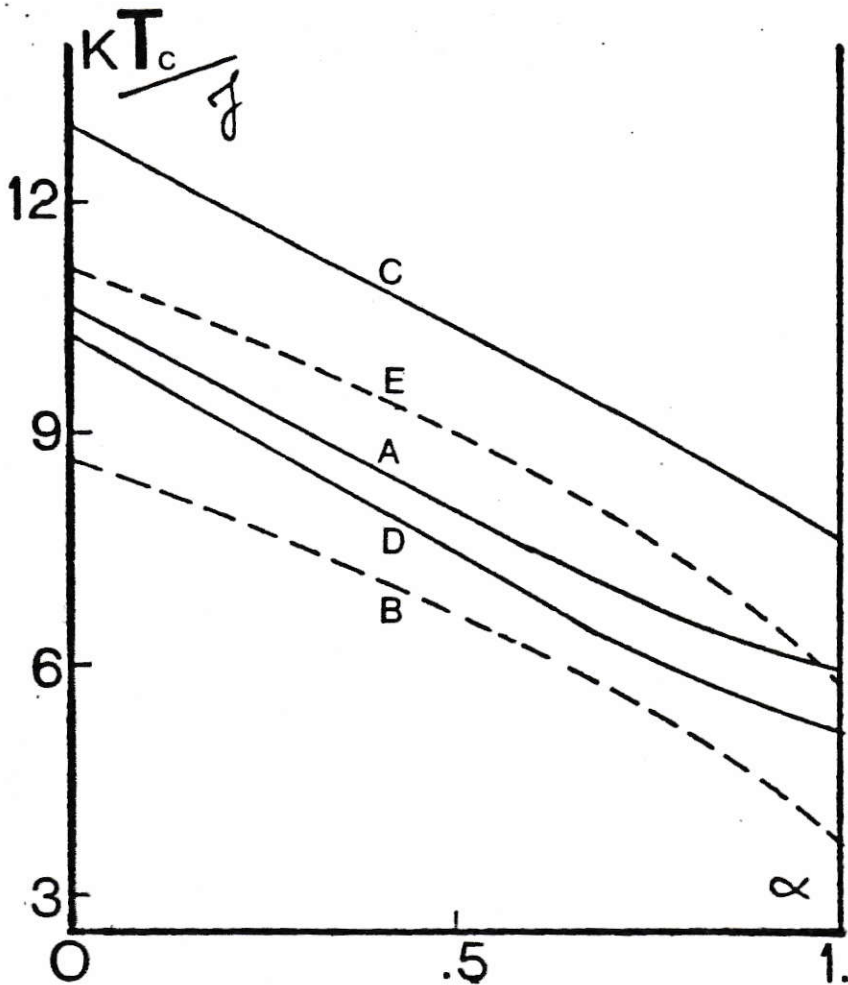


GRAFICO 10. Temperaturas críticas v/s α . Cristalino y amorfo. Comparación entre ACM (cristalino y amorfo) y refs. (12, 22) (cristalino). $d = 0$: curva a: ACM (cristalino y amorfo); curva b: refs. (12, 22). $d = 10$: curva c: ACM cristalino; curva d: ACM amorfo; curva e; refs (12, 22).

2. Aproximación de pares de Oguchi y de acoplamiento constante.

En el Capítulo IV se mencionó que la aproximación de pares de Oguchi constituía un mejoramiento de ACM, pues la interacción entre un par de iones era resuelta en forma exacta, con lo cual se consideran algunas de las propiedades de las interacciones $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)$ y $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2$.

Para resolver la ecuación (4-15), que es la que nos permite conocer las propiedades magnéticas del sistema, en su fase cristalina, se confeccionó un programa que figura en el Apéndice computacional.

Lo más importante de destacar es que cuando se considera $D=0$ (i.e. sin anisotropía) las temperaturas críticas encontradas para $\alpha > .3$ son tan bajas que incluso podría pensarse que el sistema no presenta magnetización espontánea. Sin embargo, para valores de D mayores (por ejemplo $D=10$) se encuentran soluciones para valores de α en el intervalo $0 < \alpha < .5$ (aproximadamente). Para el caso amorfo (ecuación 4-26) no fue posible encontrar soluciones del sistema de ecuaciones autoconsistentes acopladas. Tampoco se pudo determinar si esta imposibilidad de obtener soluciones se debe a que el método numérico empleado no es el más adecuado o si el sistema de

ecuaciones no tiene solución, lo que significaría que existe una seria inconsistencia en la teoría planteada. En todo caso cuando $\alpha = 0$ sólo se tiene una ecuación de autoconsistencia y las propiedades del sistema, en sus fases cristalina y amorfa, sin intercambio bicuadrático, en la aproximación de pares de Oguchi, ya han sido estudiadas (por ejemplo para la fase cristalina véase (12) y para la fase amorfa (24)). Debe además mencionarse que las ecuaciones de autoconsistencia derivadas para la aproximación de acoplamiento constante (ecuaciones (5-5) y (5-10)) fueron ambas imposibles de resolver, tanto para el caso cristalino como para el amorfo. Todo parece indicar que, al menos para el caso cristalino, el método numérico empleado no fue el más adecuado, considerando los recursos computacionales de que se dispone. Por lo tanto, de aquí en adelante nos limitaremos a comentar los resultados obtenidos usando la aproximación de pares de Oguchi para el caso cristalino.

En los Gráficos 11, 12, 13, 14, 15, 16, se muestran los valores de $\langle S_z \rangle$, $\langle S_z^2 \rangle$ y $\langle S_{1z} S_{2z} \rangle$ obtenidos al resolver la ecuación (4-15), en aquellos intervalos de los parámetros α y D en que fue posible hacerlo. En estos gráficos se observa que el sistema descrito por (4-15) presenta magnetización neta, en ausencia de campo externo. El comportamiento, cualitativo, de esta magnetización es el mismo que

el encontrado usando ACM. Las curvas para $\langle S_z^2 \rangle$ son también similares en ambas teorías.

Una importante diferencia entre ambas teorías (ACM y APO) es que en esta última se tiene una correlación entre pares ($\tau = \langle S_{1z} S_{2z} \rangle$) distinta de cero para temperaturas mayores que la temperatura de transición. En ACM los iones son estadísticamente independientes unos de otros, por lo tanto la correlación entre pares es simplemente:

$$\tau_{ACM} = \langle S_{1z} S_{2z} \rangle_{ACM} = \langle S_{1z} \rangle_{ACM} \langle S_{2z} \rangle_{ACM} = \langle S_z \rangle_{ACM}^2$$

y se anula cuando $T > T_c$. Sin embargo, puesto que APO es una aproximación de pares, los iones no son estadísticamente independientes y es interesante notar que persiste una correlación entre ellos para $T > T_c$ aunque esta no se manifieste en un orden magnético de largo alcance.

Dentro del intervalo que pudo estudiarse, se tiene que las temperaturas críticas disminuyen al aumentar el parámetro α (Gráficos); resultado ya encontrado al usar ACM. Tal comportamiento está en acuerdo con lo que se muestra en otros trabajos (12, 21, 22, 25). Sin embargo, difieren de los resultados de N. Cruz (26), quien, usando técnicas de funciones de Green, encuentra un aumento de la temperatura crítica en

función de α . Lamentablemente, puesto que α , al igual que D , no es un parámetro que puede variarse experimentalmente (como lo es la temperatura), sino que es intrínseco a cada material, no resulta claro decidir cuál es el comportamiento adecuado de las temperaturas críticas en función de α .

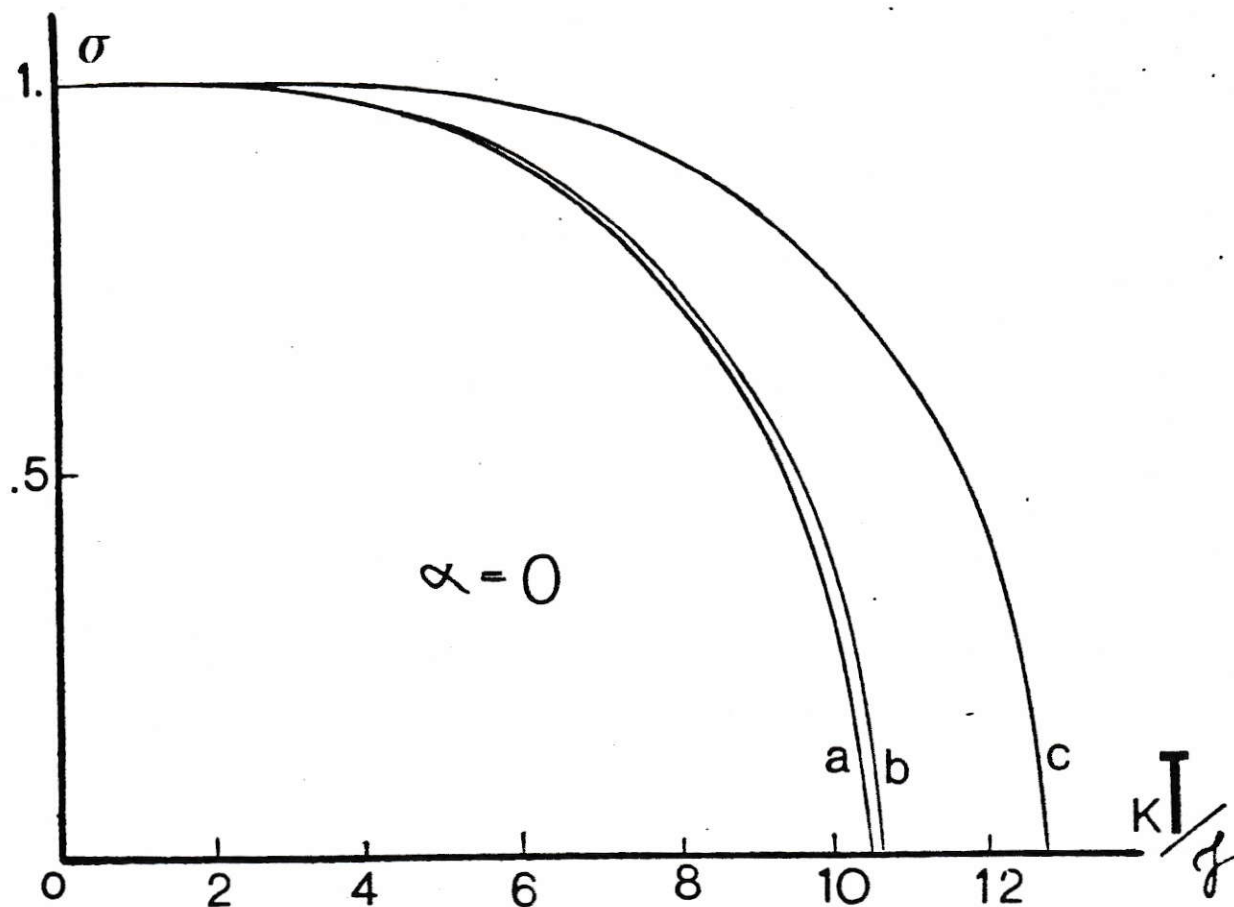


GRAFICO 11. APO, cristalino. $\sigma = (1/2)\langle S_z \rangle$, $d = D/d_f$
 $\alpha = 0$; curva a: $d = 0$; curva b: $d = .5$;
 curva c: $d = 10$.

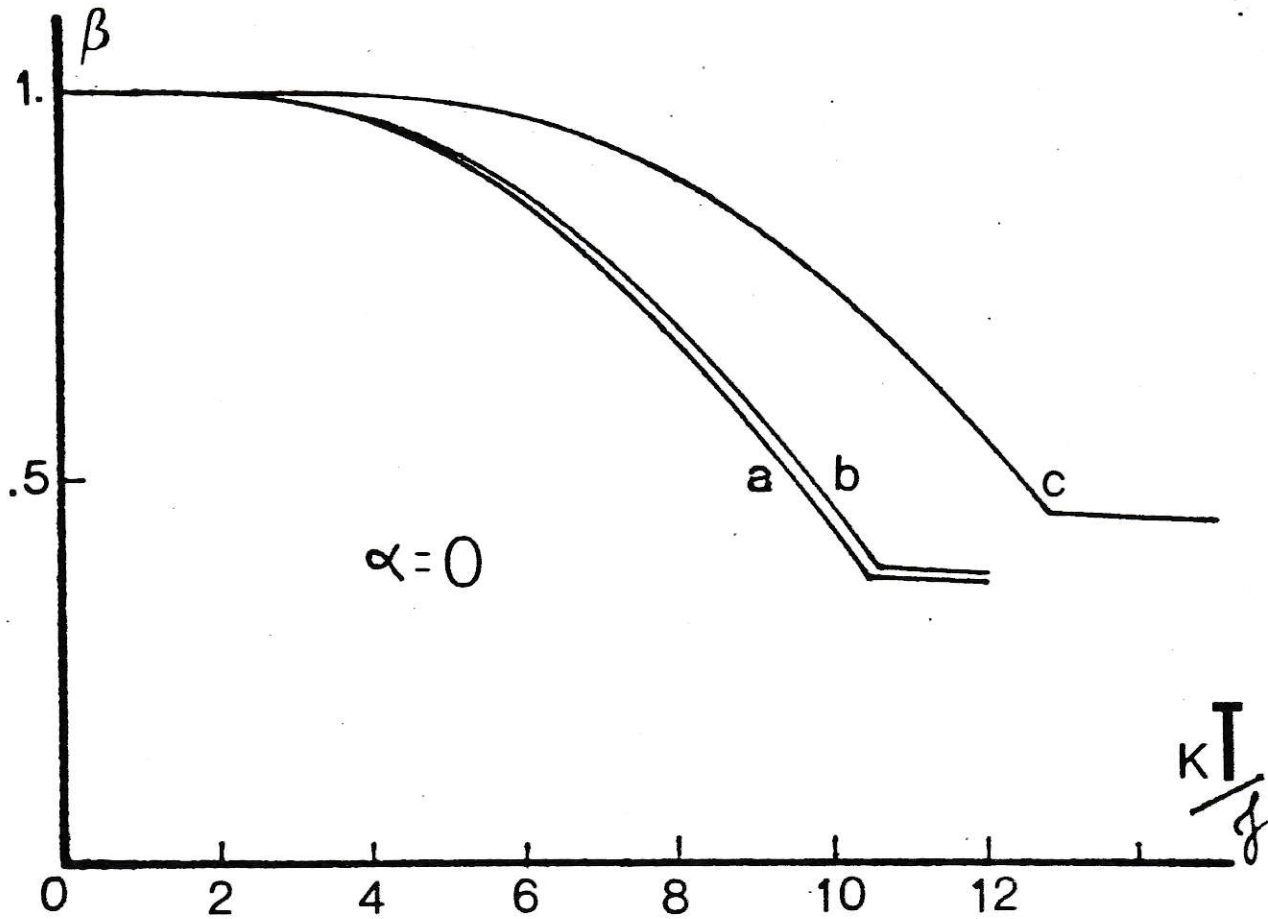


GRAFICO 12. APO, cristalino. $\beta = (1/4)\langle S_z^2 \rangle$, $d = D/d$; $\alpha = 0$
 curva a: $d = 0$; curva b: $d = .5$; curva c: $d = 10$.

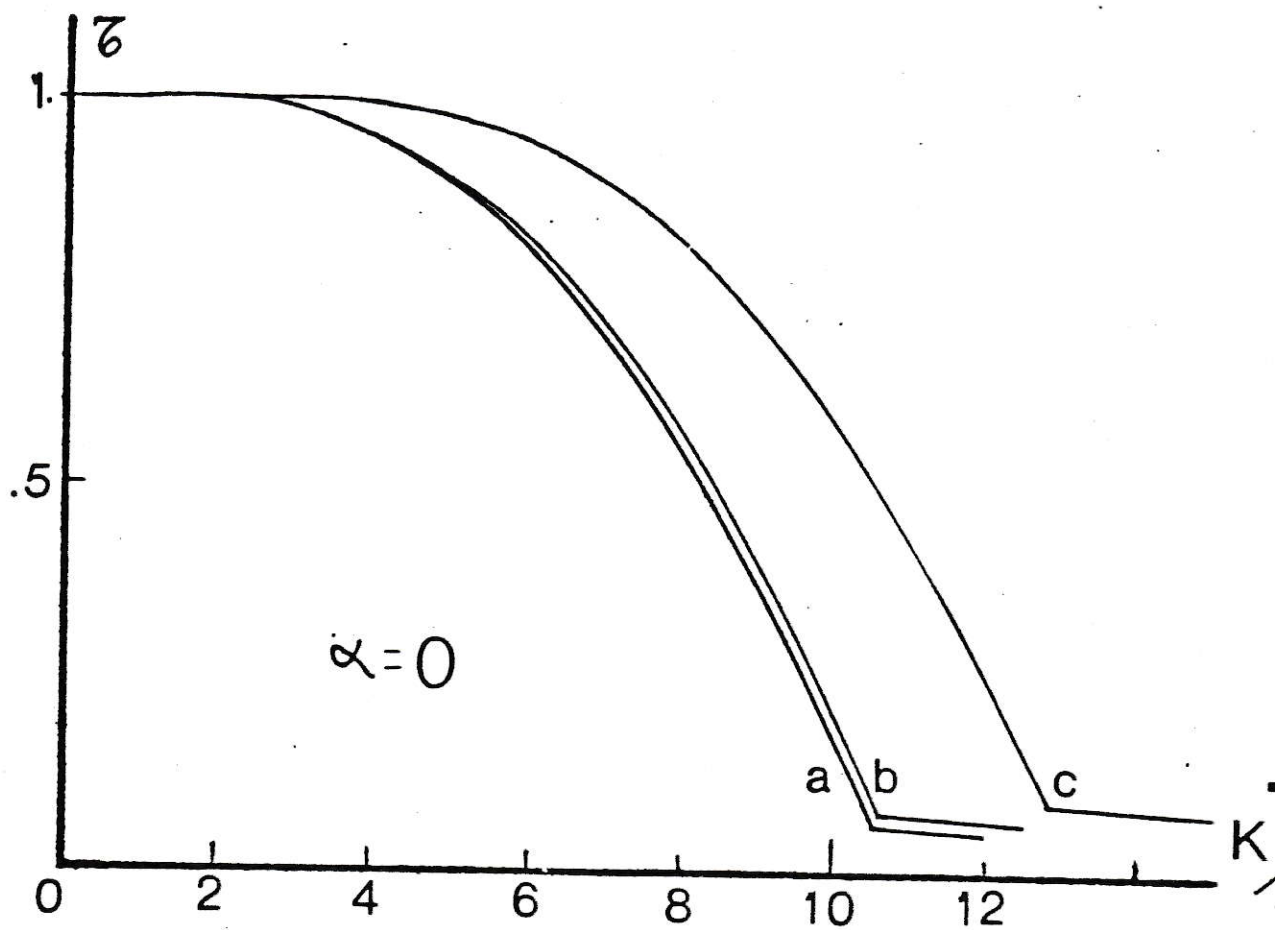


GRAFICO 13. APO, cristalino. $\tau = \langle S_{1z} S_{2z} \rangle$; $d = D/d_f$; $\alpha = 0$
 curva a: $d = 0$; curva b: $d = .5$; curva c: $d = 10$.

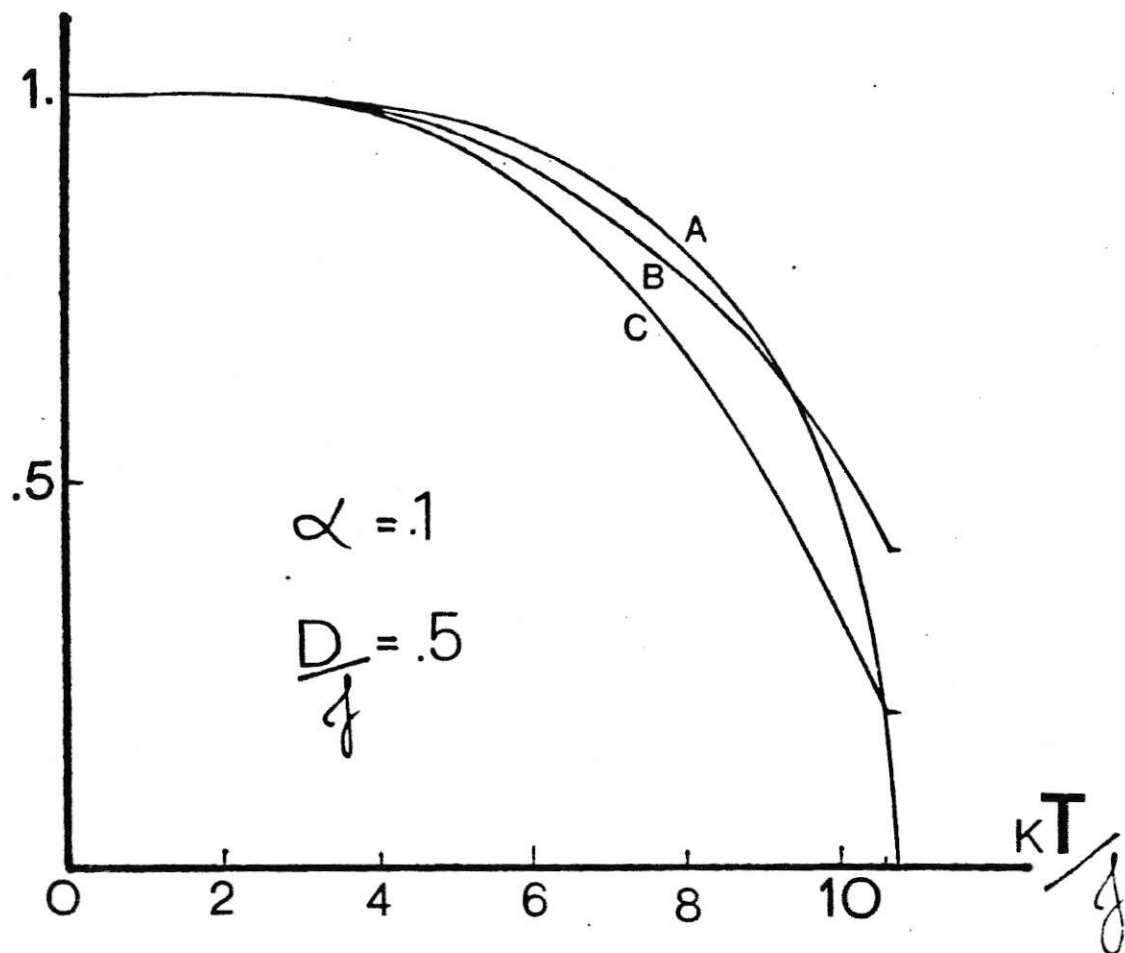


GRAFICO 14. APO, cristalino. $d = D/d$

curva a: $\sigma = (1/2) \langle S_z \rangle$;

curva b: $\beta = (1/4) \langle S_z^2 \rangle$;

curva c: $\tau = \langle S_{1z} S_{2z} \rangle$

todas para $\alpha = .1$ y $d = .5$

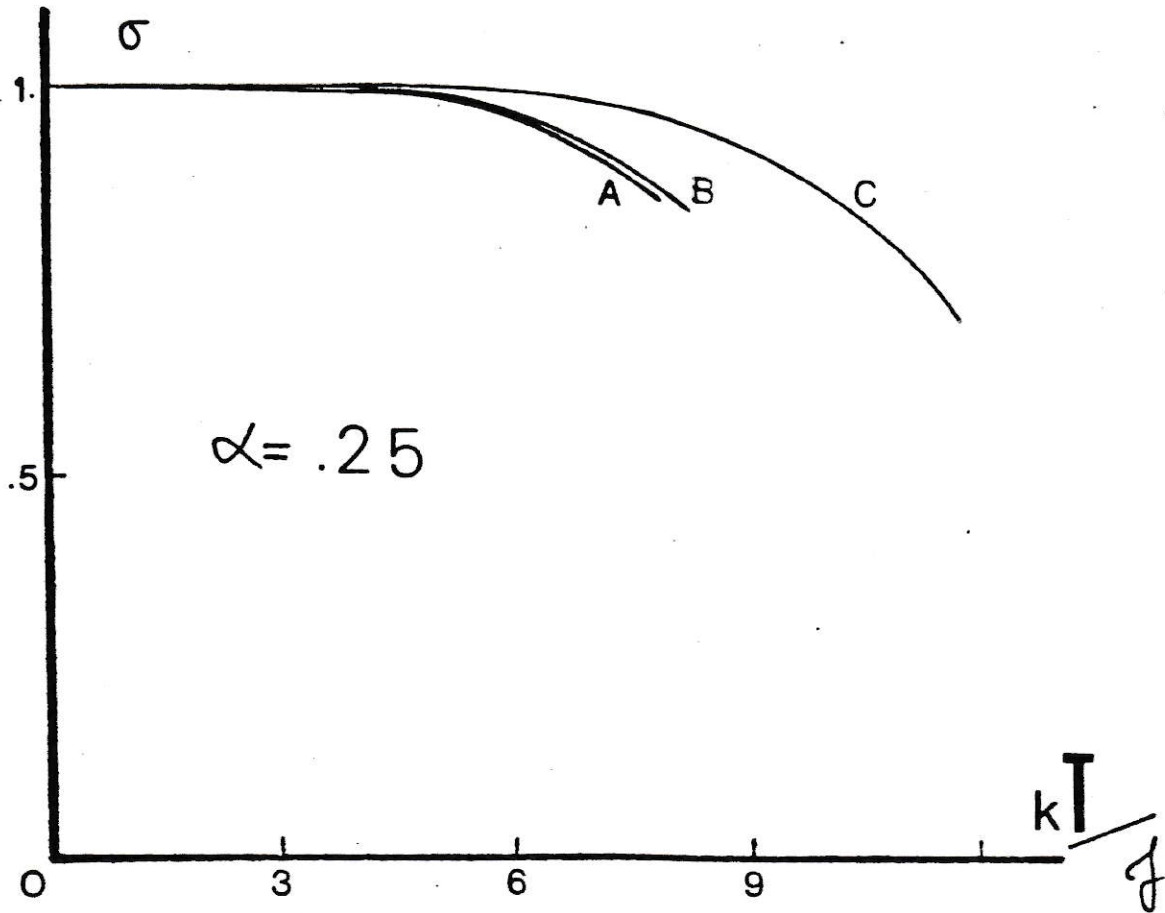


GRAFICO 15. APO, cristalino. $\sigma = (1/2) \langle S_z \rangle$; $d = D/d$;
 $\alpha = .25$; curva a: $d = 0$; curva b: $d = .5$;
 curva c: $d = 10$.

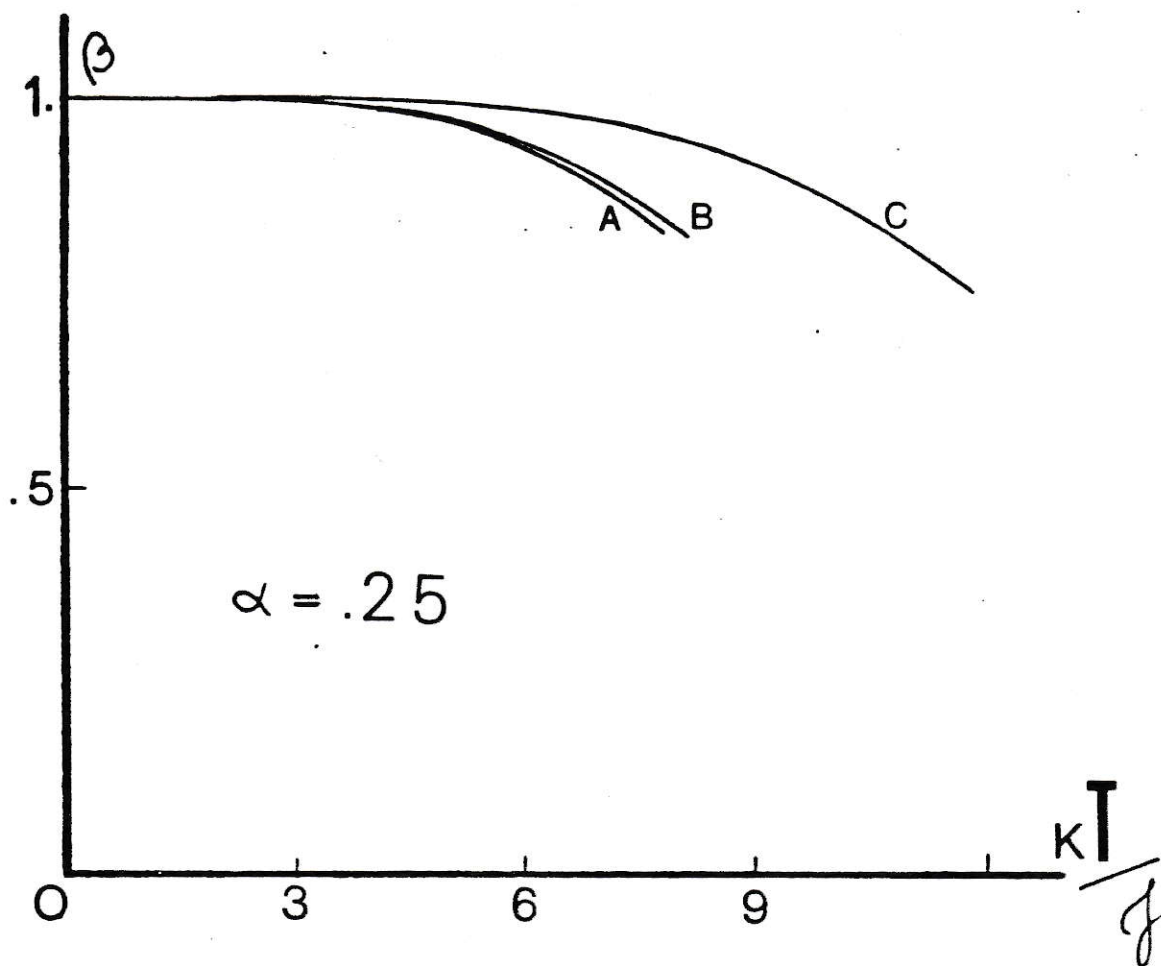


GRAFICO 16. APO, cristalino. $\beta = (1/4) \langle S_z^2 \rangle$; $d = D/d$;
 $\alpha = .25$; curva a: $d = 0.$; curva b: $d = .5$;
 curva c: $d = 10.$

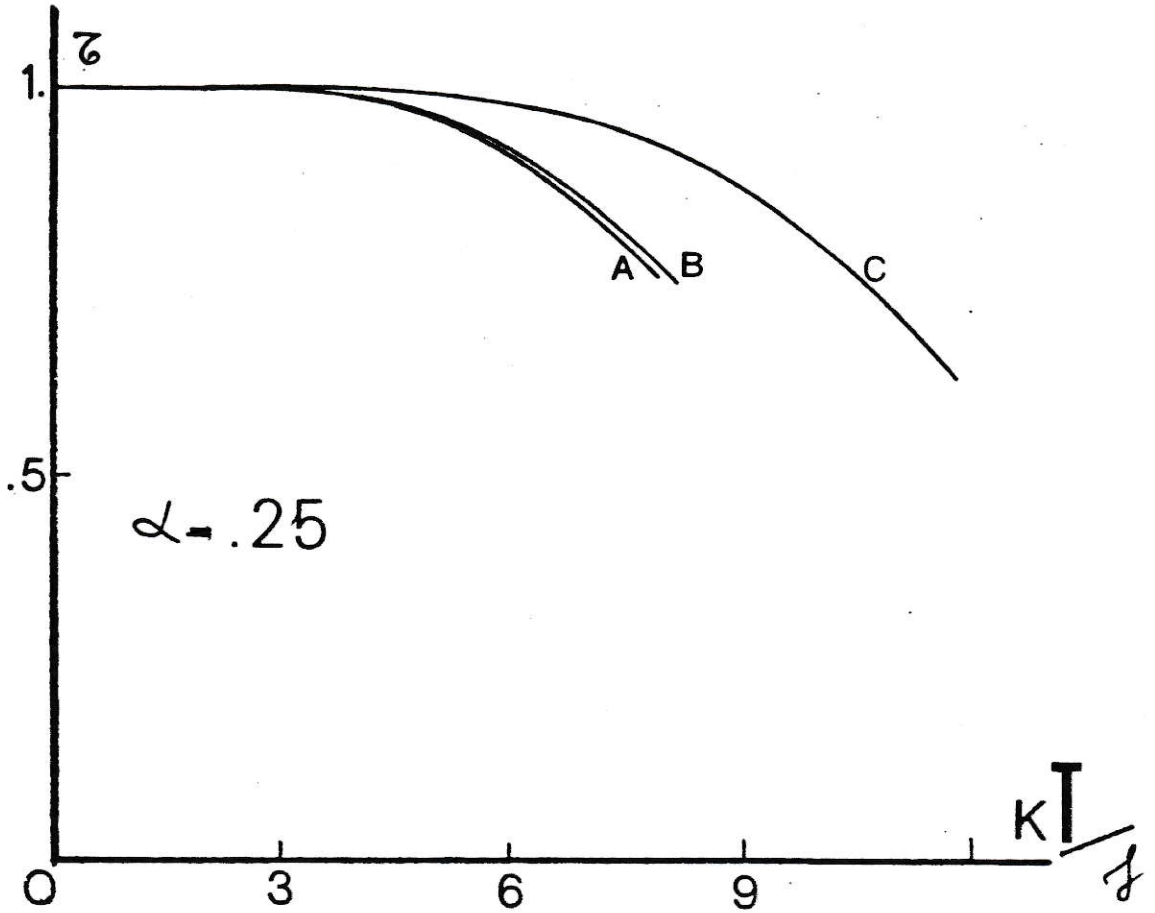


GRAFICO 17. APO, cristallino. $\tau = \langle S_{1z} S_{2z} \rangle$, $d = D/f$;
 $\alpha = .25$; curva a: $d = 0$; curva b: $d = .5$;
 curva c: $d = 10$.

El no haber solucionado las ecuaciones de autoconsistencia para el caso amorfo nos impide una mayor discusión de los resultados obtenidos. Del mismo modo el no haber encontrado soluciones en la CCA hace imposible saber si el considerar el término bicuadrático explícito en realidad constituye un mejoramiento del método, tal como se sugirió anteriormente.

Como último punto es interesante mencionar que el interés por el estudio de la influencia del término bicuadrático surgió sólo después que Harris y Owen (27) y Robdell y otros (28) mostraron que existiría una apreciable contribución de la interacción bicuadrática, a las propiedades magnéticas de ciertos sistemas antiferromagnéticos (Vg. MnO y NiO). En los materiales que ellos investigaron experimentalmente la magnitud relativa del término bicuadrático resultó ser solamente un pequeño porcentaje del usual término bilineal. Por otro lado M. Tiwari y R.N. Srivastava (29) consiguen un buen ajuste con los datos experimentales sobre variación de la energía de las ondas de spin con el vector de onda, para el hierro (a una temperatura $T = 0.86 T_c$) cuando $\alpha = 0.5$. Además, es interesante el trabajo de Nauciel-Bloch y otros (23), ellos restringen el intervalo de variación del parámetro α a fin de asegurarse de tener un estado fundamental ferromagnético y una transición de fase de 2° orden entre el estado ferromagnético y el

estado paramagnético. Por último, Brown (30), trabajando con $D = 0$ y la interacción bicuadrática implícita, en CCA, para $\text{spin} = 2$, menciona que no se encuentran soluciones para la temperatura crítica si $\alpha > .75$. Además la magnetización reducida resulta ser una función bivaluada de la temperatura, cuando kT/J es mayor que cierto valor.

Todo esto, sumado al hecho de que el término bicuadrático es considerado como una corrección al término bilineal, nos permite decir que el no haber encontrado soluciones, dentro de la APO y la CCA, para ciertos valores de α , no significa que la teoría presentada no pueda ser usada para extraer información sobre las propiedades de un ferromagneto. Más aún, todo parece indicar que el considerar valores del parámetro α muy grandes significa sobreestimar la importancia del término bicuadrático, lo cual, obviamente se traduce en problemas como los que se mostraron. Aunque queda pendiente una detallada discusión acerca de si estos problemas son producto de una inconsistencia de la teoría o un defecto del método numérico empleado para solucionar las ecuaciones.

APENDICE 1.

Consideremos un Hamiltoniano de la forma

$$\check{H} = -2 \sum_{(i,j)} f_{ij} \{ (\vec{\check{S}}_i \cdot \vec{\check{S}}_j) + \alpha_{ij} (\vec{\check{S}}_i \cdot \vec{\check{S}}_j)^2 \} \quad (\text{A-1})$$

La aproximación de campo molecular reemplaza $\check{S}_{j\nu}$ por $\langle S_{j\nu} \rangle$ con $\nu = x, y, z$. Además toma $\langle S_{jx} \rangle = \langle S_{jy} \rangle = 0$.

Con lo cual el primer término de (A-1) puede escribirse como:

$$\vec{\check{S}}_i \cdot \vec{\check{S}}_j = \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{iz} \quad (\text{A-2})$$

Para evaluar el segundo término de (A-1) se hace uso de:

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad & [\check{S}_{i\nu}, \check{S}_{j\mu}] = 0 \quad \text{cuando } i \neq j \text{ con } \mu, \nu = x, y, z \\ \text{ii)} \quad & [\check{S}_k, \check{S}_l] = i \epsilon_{klm} S_m \quad \text{con } k, l, m = x, y, z \\ \text{iii)} \quad & \langle S_{jk} S_{jl} \rangle = \frac{1}{2} \langle [S_{jk}, S_{jl}] + \{S_{jk}, S_{jl}\} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A-3})$$

y se obtiene:

$$(\vec{\check{S}}_i \cdot \vec{\check{S}}_j)^2 = \langle S_{jx}^2 \rangle \check{S}_{ix}^2 + \langle S_{jy}^2 \rangle \check{S}_{iy}^2 + \langle S_{jz}^2 \rangle \check{S}_{iz}^2 - \frac{1}{2} \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{iz} \quad (\text{A-4})$$

si ahora consideramos:

$$\langle S_{jx}^2 \rangle = \langle S_{jy}^2 \rangle = \frac{1}{2} S_j(S_j+1) - \frac{1}{2} \langle S_{jz}^2 \rangle \quad (\text{A-5})$$

y reemplazamos (A-2), (A-4) y (A-5) en (A-1) tenemos:

$$\begin{aligned} \check{H} = & -2 \sum_{(i,j)} f_{ij} \left\{ \left(1 - \frac{1}{2} \alpha_{ij} \right) \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{iz} + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} \alpha_{ij} \left[S_j(S_j+1) - \langle S_{jz}^2 \rangle \right] \check{S}_i^2 + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} \alpha_{ij} \left[3 \langle S_{jz}^2 \rangle - S_j(S_j+1) \right] \check{S}_{iz}^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{A-6})$$

El cual puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \check{H} = & -2 \sum_{(i,j)} f_{ij} \left\{ \left(1 - \frac{1}{2} \alpha_{ij} \right) \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{iz} + \right. \\ & \left. \alpha_{ij} \left[A \check{S}_i^2 + B \check{S}_{iz}^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A-7})$$

donde

$$A = \frac{1}{2} \{ S_j(S_j+1) - \langle S_{jz}^2 \rangle \} \quad \text{y}$$

$$B = \frac{1}{2} \{ 3 \langle S_{jz}^2 \rangle - S_j(S_j+1) \}$$

En esta deducción se ha supuesto que, en el sitio j , el spin tiene componente z bien definida, i.e.

$\check{S}_{jz} |S_0 M_j\rangle = M_j |S_0 M_j\rangle$, lo que significa que el Hamiltoniano efectivo tiene autoestados del tipo

$$\check{\otimes} |S_0 M_j\rangle \Rightarrow E = E(M_j),$$

APENDICE 2

2-a: Tenemos que

$$\begin{aligned} \check{H}_{p-c}^I = & -(z-1) \mathcal{f} \{ (2-\alpha) \langle S_{jz} \rangle \check{S}_{(p)z} + \alpha [S_j(S_j+1) - \langle S_{jz}^2 \rangle] \check{S}_{(p)z}^2 \\ & + \alpha [3 \langle S_{jz}^2 \rangle - S_j(S_j+1)] \check{S}_{(p)z}^2 \} \end{aligned} \quad (A-8)$$

reemplazando (4-5) en (A-8), para $S_j=1$, se obtiene:

$$\begin{aligned} \check{H}_{p-c}^I = & -(z-1) \mathcal{f} \{ (2-\alpha) \left(\frac{1}{2}\right) \langle S_{(p)z} \rangle \check{S}_{(p)z} + \\ & \alpha \left[2 - \left(\frac{1}{2}\right) \langle S_{(p)z}^2 \rangle + \langle S_{1z} S_{2z} \rangle \right] \check{S}_{(p)z}^2 + \\ & \alpha \left[\frac{3}{2} \langle S_{(p)z}^2 \rangle - 3 \langle S_{1z} S_{2z} \rangle - 2 \right] \check{S}_{(p)z}^2 \} \end{aligned} \quad (A-9)$$

Este Hamiltoniano es diagonal en la base $\{|SM\rangle\}$ por lo tanto sus autovalores E_{SM} son:

$$\begin{aligned} E_{SM}^I = & -(z-1) \mathcal{f} \{ (2-\alpha) \left(\frac{1}{2}\right) \langle S_z \rangle M + \alpha \left[2 - \frac{1}{2} \langle S_z^2 \rangle + \langle S_{1z} S_{2z} \rangle \right] \\ & S(S+1) + \alpha \left[\frac{3}{2} \langle S_z^2 \rangle - 3 \langle S_{1z} S_{2z} \rangle - 2 \right] M^2 \} \end{aligned} \quad (A-10)$$

donde se ha omitido el índice p pues todo se refiere al par.

Reemplazando los valores adecuados de S y M en (A-10) se obtienen los autovalores mostrados en (4-6).

2-b: Cálculo de los elementos de matriz de $(S_{1z}S_{2z})$

Usando que

$$|SM\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle S_1 S_2 m_1 m_2 | SM \rangle |S_1 S_2 m_1 m_2\rangle \quad (\text{A-11})$$

tenemos:

$$\begin{aligned} |22\rangle &= |1111\rangle \\ |21\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |1110\rangle + |1101\rangle \} \\ |20\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ |111-1\rangle + |11-11\rangle + 2|1100\rangle \} \\ |2-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |11-10\rangle + |110-1\rangle \} \\ |2-2\rangle &= |11-11\rangle \\ |11\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |1110\rangle - |1101\rangle \} \\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |111-1\rangle - |11-11\rangle \} \\ |1-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |110-1\rangle - |11-10\rangle \} \end{aligned} \quad (\text{A-12})$$

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ |111-1\rangle + |11-11\rangle - |1100\rangle \}$$

Por lo tanto:

$$\text{i) } \langle 22 | S_{1z} S_{2z} | 22 \rangle = \langle 1111 | S_{1z} S_{2z} | 1111 \rangle = 1 \quad (\text{A-13})$$

$$\langle 22 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \text{ si } |SM\rangle \neq |22\rangle$$

$$\text{ii) } \langle 21 | S_{1z} S_{2z} | 21 \rangle = 0 \quad (\text{A-14})$$

$$\langle 21 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \forall |SM\rangle$$

$$\text{iii) } \langle 20 | S_{1z} S_{2z} | 20 \rangle = -1/3$$

$$\langle 20 | S_{1z} S_{2z} | 00 \rangle = -\sqrt{2}/3 \quad (\text{A-15})$$

$$\langle 20 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \forall |SM\rangle \neq \{ |20\rangle, |00\rangle \}$$

$$\text{iv) } \langle 2-1 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \forall |SM\rangle \quad (\text{A-16})$$

$$\text{v) } \langle 2-2 | S_{1z} S_{2z} | 2-2 \rangle = 1 \quad (\text{A-17})$$

$$\langle 2-2 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \text{ si } |SM\rangle \neq |2-2\rangle$$

$$\text{vi) } \langle 11 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \forall |SM\rangle \quad (\text{A-18})$$

$$\text{vii) } \langle 10 | S_{1z} S_{2z} | 10 \rangle = -1 \quad (\text{A-19})$$

$$\langle 10 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \text{ si } |SM\rangle \neq |10\rangle$$

$$\text{viii) } \langle 1-1 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \forall |SM\rangle \quad (\text{A-20})$$

$$\text{ix) } \langle 00 | S_{1z} S_{2z} | 00 \rangle = -2/3$$

$$\langle 00 | S_{1z} S_{2z} | 20 \rangle = -\sqrt{2}/3 \quad (\text{A-21})$$

$$\langle 00 | S_{1z} S_{2z} | SM \rangle = 0, \text{ si } |SM\rangle \neq \{ |00\rangle, |20\rangle \}$$

Con esto se tienen los elementos de matriz de $(S_{1z}S_{2z})$ que aparecen en (4-10).

APENDICE 3

Los elementos de la base $\{|SM\rangle\}$ no son autovectores de:

$$\check{H}^A = -D(\check{S}_{1z}^2 + \check{S}_{2z}^2) \quad (\text{A-22})$$

por lo tanto los elementos de matriz de este Hamiltoniano se calcularán usando la base $\{|S_2S_{2m_1}m_2\rangle\}$. La ecuación (A-12) relaciona ambas bases y luego de un poco de álgebra se tiene:

$$\begin{aligned} \langle 22 | \check{H}^A | 22 \rangle &= -2D \\ \langle 21 | \check{H}^A | 21 \rangle &= -D \\ \langle 20 | \check{H}^A | 20 \rangle &= -(2/3) D \\ \langle 2-1 | \check{H}^A | 2-1 \rangle &= -D \\ \langle 2-2 | \check{H}^A | 2-2 \rangle &= -2D \\ \langle 11 | \check{H}^A | 11 \rangle &= -D \\ \langle 10 | \check{H}^A | 10 \rangle &= -2D \\ \langle 1-1 | \check{H}^A | 1-1 \rangle &= -D \\ \langle 00 | \check{H}^A | 00 \rangle &= -(4/3)D \end{aligned} \quad (\text{A-23})$$

$$\langle 20 | \check{X}^A | 00 \rangle = \langle 00 | \check{X}^A | 20 \rangle = - (2 \sqrt{2}/3) D$$

todos los demás elementos de matriz de \check{X}^A son nulos.

Esto demuestra la relación (4-13).

APENDICE 4

Según (4-22)

$$\begin{aligned} \check{S}_{1z_1}^2 &= \frac{1}{4} v_1^2 (\check{S}_{1+}^2 + \check{S}_{1-}^2 + \check{S}_{1+}\check{S}_{1-} + \check{S}_{1-}\check{S}_{1+}) + \mu_1^2 \check{S}_{1z}^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} \mu_1 v_1 (\check{S}_{1+}\check{S}_{1z} + \check{S}_{1z}\check{S}_{1+} + \check{S}_{1-}\check{S}_{1z} + \check{S}_{1z}\check{S}_{1-}) \end{aligned} \quad (A-24)$$

$$\begin{aligned} \check{S}_{2z_2}^2 &= \frac{1}{4} v_2^2 (\check{S}_{2+}^2 + \check{S}_{2-}^2 + \check{S}_{2+}\check{S}_{2-} + \check{S}_{2-}\check{S}_{2+}) + \mu_2^2 \check{S}_{2z}^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} \mu_2 v_2 (\check{S}_{2+}\check{S}_{2z} + \check{S}_{2z}\check{S}_{2+} + \check{S}_{2-}\check{S}_{2z} + \check{S}_{2z}\check{S}_{2-}) \end{aligned}$$

por lo tanto:

$$\begin{aligned} \check{X}^A |s_1 s_2 m_1 m_2\rangle &= -D(\check{S}_{1z_1}^2 + \check{S}_{2z_2}^2) |s_1 s_2 m_1 m_2\rangle \\ &= -D(\check{S}_{1z}^2 |s_1 s_2 m_1 m_2\rangle + \check{S}_{2z}^2 |s_1 s_2 m_1 m_2\rangle) \end{aligned} \quad (A-25)$$

Definiendo $a = (\frac{1}{4})v_1^2$, $b = \mu_1^2$ y $c = (\frac{1}{2})v_1\mu_1$ se tiene:

$$\check{S}_{1z_1}^2 |s_1 s_2 m_1 m_2\rangle =$$

$$a \sqrt{S_1(S_1+1)-m_1(m_1+1)} \sqrt{S_1(S_1+1)-(m_1+1)(m_1+2)} / S_1 S_2 m_1 + 2m_2 > +$$

$$a \sqrt{S_1(S_1+1)-m_1(m_1-1)} \sqrt{S_1(S_1+1)-(m_1-1)(m_1-2)} / S_1 S_2 m_1 - 2m_2 > +$$

$$\{2a [S_1(S_1+1)-m_1^2] + b m_1^2\} / S_1 S_2 m_1 m_2 > -$$

(A-26)

$$c(2m_1+1) \sqrt{S_1(S_1+1)-m_1(m_1+1)} / S_1 S_2 m_1 + 1m_2 > -$$

$$c(2m_1-1) \sqrt{S_1(S_1+1)-m_1(m_1-1)} / S_1 S_2 m_1 - 1m_1 >$$

Para $\check{S}_{2z_2}^2 / S_1 S_2 m_1 m_2 >$ se obtiene una expresión análoga.

Para el caso de iones con spin = 1 se tiene que

$$|S_1 S_2 m_1 m_2 > = |11 m_1 m_2 > \quad (A-27)$$

si además se mantiene en mente la ortonormalidad de la base

$\{|S_1 S_2 m_1 m_2 >\}$ i.e.

$$\langle S_1 S_1 m_1' m_2' | S_1 S_2 m_1 m_2 > = \delta_{m_1, m_1'} \delta_{m_2, m_2'} \quad (A-28)$$

resulta más fácil evaluar (A-26).

Usando un procedimiento totalmente análogo se evalúan

$\check{S}_{2z_2}^2 |S_1 S_2 m_1 m_2 >$, y se obtienen los elementos de matriz de

\check{H}^A .

C Ferromagneto de Heisenberg anisotropico con intercambio bicuadratico,
 C en Aproximacion de Campo Molecular. (Spin = 1)
 C J=1.=Intercambio; A=Intercambio Bicuadratico; D=Anisotropia
 C DJ= D/J = d ; TJ= KT/J ; ** Z= 8 VECINOS ** ---- CRISTALINO ----

```

COMMON /UNO/ A,DJ,SZ,SZ
OPEN(2,FILE='RDATOS.DAT',STATUS='OLD')
READ (2,11) A,DJ,TJ,TJC,DELTA,S2,SG0,SG1
11 FORMAT(2X,F4.2,3X,F5.1,3X,F5.2,4X,F5.2,5X,F4.2,4X,F4.2,2(5X,F4.2))
WRITE (*,345) A,DJ
345 FORMAT(10X,'A=',F5.2,10X,'DJ=',F6.2,10X,'A.C.M. CRISTALINO',/)
CLOSE (2)
ER=0.000001
15 CONTINUE
N=0
20 R=FUNSZ(TJ,SG0)
AR=ABS(R)
IF (AR.LT.ER) GO TO 30
P=FUNSZ(TJ,SG1)
AP=ABS(P)
IF (AP.LT.ER) GO TO 35
IF (P*R) 70,71,71
71 SG0=SG0/1.3
SG1=SG1+0.1
N=N+1
IF (N.LT.30) GO TO 20
GO TO 80
70 SG2=((AR/AP)*SG1+SG0)/(1.+(AR/AP))
FSG2=FUNSZ(TJ,SG2)
IF (FSG2) 60,50,40
60 SG0=SG2
GO TO 20
40 SG1=SG2
GO TO 20
50 SZ=SG2
GO TO 100
80 SZ=0.
WRITE (*,81) TJ
21 FORMAT(2X,'TJ=',F4.2,5X,'No se encuentra solucion para < Sz > ( /)

```



```

    GO TO 100
30  SZ=S60
    GO TO 100
35  SZ=S61
100 CONTINUE
150 Z60=0.6
    Z61=0.95
    NN=0
200 RR=FUNSZ2(TJ,Z60)
    ARR=ABS(RR)
    IF(ARR.LT.ER) GO TO 300
    PP=FUNSZ2(TJ,Z61)
    APP=ABS(PP)
    IF(APP.LT.ER) GO TO 350
    IF(PP*RR)700,710,710
710  Z60=Z60/1.25
    Z61=Z61+0.1
    NN=NN+1
    IF(NN.LT.20) GO TO 200
    GO TO 800
700  Z62=((ARR/APP)*Z61+Z60)/(1.+(ARR/APP))

    FZ62=FUNSZ2(TJ,Z62)
    IF(FZ62) 600,500,400
600  Z60=Z62
    GO TO 200
400  Z61=Z62
    GO TO 200
500  Z2=Z62
    GO TO 1000
800  WRITE (*,210) TJ,SZ
210  FORMAT(2X,'TJ=',F6.2,4X,' < Sz >=',F7.4,4X,'NO SOLUC. < Sz2 >')
    GO TO 105
300  Z2=Z60
    GO TO 1000
350  Z2=Z61
1000 CONTINUE
    DIF=ABS(S2-Z2)
    IF(DIF.LT.ER) GO TO 5000
    S2=Z2

```

```

        GO TO 15
5000 V=3.*S2-2.
        WRITE(*,555) TJ,SZ,S2,V
555  FORMAT(2X,'TJ=',F6.2,4X,'<Sz>=',F7.4,4X,'<Sz 2>=',F7.4,5X,'V=',
        *F7.4,/)
105  TJ=TJ+DELTA
        IF (TJC-TJ) 25,15,15
25  CONTINUE
        STOP
        END

```

```

FUNCTION FUNSZ (T,S1)
COMMON /UNQ/ A,DJ,S2,SZ
E1=8.*(A-2.)*S1-8.*A*(2.+S2)-DJ
E0=16.*A*(S2-2.)
E2=8.*(2.-A)*S1-8.*A*(2.+S2)-DJ
EX1=EXP(-E1/T)
EX0=EXP(-E0/T)
EX2=EXP(-E2/T)
ARRI=EX1-EX2
ABAJ=EX1+EX0+EX2
XXX=ARRI/ABAJ
FUNSZ=S1-XXX
RETURN
END

```

```

FUNCTION FUNSZ2 (T,H2)
COMMON /UNQ/ A,DJ,S2,SZ
E1=8.*(A-2.)*SZ-8.*A*(2.+H2)-DJ
E0=16.*A*(H2-2.)
E2=8.*(2.-A)*SZ-8.*A*(2.+H2)-DJ
EX1=EXP(-E1/T)
EX0=EXP(-E0/T)
EX2=EXP(-E2/T)
SUP=EX1+EX2
ZZZ=SUP/(SUP+EX0)
FUNSZ2=H2-ZZZ
RETURN
END

```

C Ferrmagneto de Heisenberg anisotropico con intercambio bicuadratico,
C en Aproximacion de Pares de Oguchi (spin = 1)
C J=1.=Intercambio; A=Intercambio Bicuadratico; D=Anisotropia
C DJ=D/J = d ; TJ= kT/J ; ** Z=8 Vecinos ** CRISTALINO -- OGUCHI
C

```
    IMPLICIT REAL *B (A-H,O-Z)
    COMMON /CERO/ A,DJ,S2,SZ,SUS
    OPEN(2,FILE='RDATOS.DAT',STATUS='OLD')
    READ (2,11) A,DJ,TJ,TJC,DELTA,S2,SG0,SG1,SXX
11  FORMAT(2X,F4.2,3X,F5.1,3X,F5.2,4X,F5.2,5X,F4.2,4X,F4.2,3(5X,F4.2))
    WRITE (*,345) A,DJ
345  FORMAT(10X,'A=',F5.2,10X,'DJ=',F6.2,10X,'OGUCHI - CRISTALINO',/)
    CLOSE (2)
    SUS=SXX
    NHUE=0
    ER=0.00001
15  CONTINUE
    SG0=SG0
    SG1=SG1
    N=0
20  R=FUNSZ(TJ,SG0)
    AR=DABS(R)
    IF (AR.LT.ER) GO TO 30
    P=FUNSZ(TJ,SG1)
    AP=DABS(P)
    IF (AP.LT.ER) GO TO 35
    IF (P*R) 70,71,71
71  SG0=SG0/1.25
    SG1=SG1+0.1
    N=N+1
    IF (N.LT.30) GO TO 20
    GO TO 80
70  SG2=(AR*SG1+AP*SG0)/(AP+AR)
    FSG2=FUNSZ(TJ,SG2)
    IF (FSG2) 60,50,40
60  SG0=SG2
    GO TO 20
40  SG1=SG2
    GO TO 20
```

```

50 SZ=S62
   GO TO 100
80 SZ=0.
   WRITE (*,81) TJ
81 FORMAT(2X,'TJ=',F6.2,5X,'No se encuentra solucion para < Sz >.',/)
   NHUE=NHUE+1
   IF (NHUE.GT.5 ) STOP
   GO TO 100
30 SZ=S60
   GO TO 100
35 SZ=S61
100 CONTINUE
150 ZG0=0.3
   ZG1=3.9
   NN=0
200 RR=FNSZ2(TJ,ZG0)
   ARR=DABS(RR)
   IF (ARR.LT.ER) GO TO 300
   PP=FNSZ2(TJ,ZG1)
   APP=DABS(PP)
   IF (APP.LT.ER) GO TO 350

   IF (PP*RR) 700,710,710
710 ZG0=ZG0/1.25
   ZG1=ZG1+0.1
   NN=NN+1
   IF (NN.LT.20) GO TO 200
   GO TO 800
700 ZG2=(ARR*ZG1+APP*ZG0)/(APP+ARR)
   FZG2=FNSZ2(TJ,ZG2)
   IF (FZG2) 600,500,400
600 ZG0=ZG2
   GO TO 200
400 ZG1=ZG2
   GO TO 200
500 Z2=ZG2
   GO TO 1000
800 WRITE (*,810) TJ,SZ
810 FORMAT(2X,'TJ=',F6.2,4X,'< Sz >=',F7.4,4X,'NO soluc. < Sz2 >')
   GO TO 105

```

```
300 Z2=Z60
    GO TO 1000
350 Z2=Z61
1000 CONTINUE
    DIF=DABS(S2-Z2)
    IF(DIF.LT.ER) GO TO 160
    S2=Z2
    GO TO 15
160 XG0=0.1
    XG1=1.
    MM=0
210 XR=FNS1S2(TJ,XG0)
    XRR=DABS(XR)
    IF(XRR.LT.ER) GO TO 310
    XP=FNS1S2(TJ,XG1)
    XPP=DABS(XP)
    IF(XPP.LT.ER) GO TO 360
    IF(XP*XR) 720,730,730
730 XG0=XG0/1.25
    XG1=XG1+0.1
    MM=MM+1
    IF(MM.LT.15) GO TO 210
    GO TO 820
720 XG2=(XRR*XG1+XG0*XPP)/(XPP+XRR)
    FXG2=FNS1S2(TJ,XG2)
    IF(FXG2) 610,510,410
610 XG0=XG2
    GO TO 210
410 XG1=XG2
    GO TO 210
510 X2=XG2
    GO TO 1010
820 WRITE (*,822) TJ,SZ,S2
822 FORMAT(2X,'TJ',F6.2,4X,'<Sz>',F7.4,4X,'<Sz 2>',F7.4,4X,'** NO **')
    GO TO 105
310 X2=XG0
    GO TO 1010
360 X2=XG1
1010 CONTINUE
```

```
1 DYF=DABS(SUS-X2)
  IF(DYF.LT.ER) GO TO 5000
  SUS=X2
```

```
    GO TO 15
5000 G=SZ/2.
    WRITE(*,555) TJ,SZ,G,S2,SUS
  555 FORMAT(2X,'TJ=',F6.2,4X,'<Sz>=',F7.4,4X,'G=',F7.4,4X,'<Sz 2>=',
    *F7.4,4X,'<S1zS2z>=',F7.4,/)
  105 TJ=TJ+DELTA
    IF(TJC-TJ) 25,15,15
  25 STOP
    END
```

```
FUNCTION FUNSZ (T,S1)
  IMPLICIT REAL *8 (A-H,O-Z)
  COMMON /CERO/ A,DJ,S2,SZ,SUS
  DIMENSION H(45),OSZ(9,9),AV(9,9),R(81),D(9)
  DO 10 IN=1,9
  DO 10 JN=1,9
  OSZ(IN,JN)=0.
  10 CONTINUE
  OSZ(1,1)= 2.
  OSZ(2,2)= 1.
  OSZ(4,4)=-1.
  OSZ(5,5)=-2.
  OSZ(6,6)= 1.
  OSZ(8,8)=-1.
  DO 14 IK=1,45
  H(IK)=0.
  14 CONTINUE
  DMA=2.-A
  ASD=A*S2
  ASS=A*SUS
  H(1) =-2.*(1.+A)-7.*S1*DMA-21.*ASD+42.*ASS-28.*A-2.*DJ
  H(3) =-2.*(1.+A)-3.5*S1*DMA+10.5*ASD-21.*ASS-70.*A-DJ
  H(6) =-2.*(1.+A)+21.*ASD-42.*ASS-84.*A-0.6666666*DJ
  H(10)=-2.*(1.+A)+3.5*S1*DMA+10.5*ASD-21.*ASS-70.*A-DJ
  H(15)=-2.*(1.+A)+7.*S1*DMA-21.*ASD+42.*ASS-28.*A-2.*DJ
  H(21)= 2.*(1.-A)-3.5*S1*DMA-3.5*ASD+7.*ASS-14.*A-DJ
```



```

H(28)= 2.*(1.-A)-7.*A*(4.-S2+2.*SUS)-2.*DJ
H(36)= 2.*(1.-A)+3.5*S1*DMA-3.5*ASD+7.*ASS-14.*A-DJ
H(39)=-0.942809*DJ
H(45)= 4.-8.*A-1.333333*DJ
CALL EIGEN (H,R,9,0)
L=0
DO 99 M=1,9
L=L+M
99 D(M)=H(L)
DO 502 K=1,9
DO 501 I=1,9
501 AV(I,K)=R(9*(K-1)+I)
502 CONTINUE
TRAC=0.
PART=0.
DO 701 K=1,9
AD=DEXP(-D(K)/T)
DO 702 J=1,9
DO 702 I=1,9
702 TRAC=TRAC+AV(I,K)*DSZ(I,J)*AV(J,K)*AD
701 PART=PART+AD
XXX=TRAC/PART
FUNSZ=S1-XXX
RETURN

```

```

FUNCTION FNSZ2 (T,H2)
IMPLICIT REAL *B (A-H,O-Z)
COMMON /CERO/ A,DJ,S2,SZ,SUS
DIMENSION HX(45),SZD(9,9),AX(9,9),RX(81),DX(9)
DO 44 IN=1,9
DO 44 JN=1,9
SZD(IN,JN)=0.
44 CONTINUE
SZD(1,1)=4.
SZD(2,2)=1.
SZD(4,4)=1.
SZD(5,5)=4.
SZD(6,6)=1.
SZD(8,8)=1.

```

```

DO 14 I=1,45
HX(I)=0.
14 CONTINUE
DMA=2.-A
AHD=A*H2
ASS=A*SUS
HX(1) =-2.*(1.+A)-7.*SZ*DMA-21.*AHD+42.*ASS-28.*A-2.*DJ
HX(3) =-2.*(1.+A)-3.5*SZ*DMA+10.5*AHD-21.*ASS-70.*A-DJ
HX(6) =-2.*(1.+A)+21.*AHD-42.*ASS-84.*A-0.666666*DJ
HX(10)=-2.*(1.+A)+3.5*SZ*DMA+10.5*AHD-21.*ASS-70.*A-DJ
HX(15)=-2.*(1.+A)+7.*SZ*DMA-21.*AHD+42.*ASS-28.*A-2.*DJ
HX(21)= 2.*(1.-A)-3.5*SZ*DMA-3.5*AHD+7.*ASS-14.*A-DJ
HX(28)= 2.*(1.-A)+7.*AHD-14.*ASS-28.*A-2.*DJ
HX(36)= 2.*(1.-A)+3.5*SZ*DMA-3.5*AHD+7.*ASS-14.*A-DJ
HX(39)=-0.942809*DJ
HX(45)= 4.-8.*A-1.333333*DJ
CALL EIGEN (HX,RX,9,0)
L=0
DO 99 M=1,9
L=L+M
99 DX(M)=HX(L)
DO 502 K=1,9
DO 501 I=1,9
501 AX(I,K)=RX(9*(K-1)+I)
502 CONTINUE
TRAC=0.
PART=0.
DO 701 K=1,9
AD=DEXP(-DX(K)/T)
DO 702 J=1,9
DO 702 I=1,9
702 TRAC=TRAC+AX(I,K)*SZD(I,J)*AX(J,K)*AD
701 PART=PART+AD
ZZZ=TRAC/PART
FNSZ2=H2-ZZZ
RETURN
END

```

```

TRAC=0.
PART=0.
DO 701 K=1,9
AD=DEXP(-DY(K)/T)
DO 702 J=1,9
DO 702 I=1,9
702 TRAC=TRAC+AY(I,K)*S12Z(I,J)*AY(J,K)*AD
701 PART=PART+AD
YYY=TRAC/PART
FNS1S2=W-YYY
RETURN
END

```

SUBROUTINE EIGEN (A,R,N,MV)

C A : Es la matriz a diagonalizar, REAL y SIMETRICA
C R : Es un VECTOR COLUMNA donde estan los autovectores NORMALIZADOS
C N : Es la DIMENSION de la matriz
C MV = 0 Indica entregar autovalores Y autovectores

```

IMPLICIT REAL *8 (A-H,O-Z)
DIMENSION A(1),R(1)
5 RANGE=1.0D-6
IF(MV-1) 10,25,10
10 IQ=-N
DO 20 J=1,N
IQ=IQ+N

DO 20 I=1,N
IJ=IQ+I
R(IJ)=0.
IF(I-J) 20,15,20
15 R(IJ)=1.
20 CONTINUE
25 ANORM=0.
DO 35 I=1,N
DO 35 J=I,N
IF(I-J) 30,35,30
30 IA=I+(J+J-I)/2
ANORM=ANORM+A(IA)*A(IA)
35 CONTINUE

```

```

        IF (ANORM) 165,165,40
40  ANORM=1.414*DSQRT (ANORM)
    ANRMX=ANORM*RANGE/DBLE (N)
    IND=0
    THR=ANORM
45  THR=THR/DBLE (N)
50  L=1
55  M=L+1
60  MQ=(M*M-M)/2
    LQ=(L*L-L)/2
    LM=L+MQ
62  IF (DABS (A (LM)) - THR) 130,65,65
65  IND=1
    LL=L+LQ
    MM=M+MQ
    X=0.5*(A (LL) - A (MM))
68  Y=-A (LM) / DSQRT (A (LM)*A (LM) + X*X)
    IF (X) 70,75,7
70  Y=-Y
75  SINX=Y/DSQRT (2.*(1.+(DSQRT (1.-Y*Y))))
    SINX2=SINX*SINX
78  COSX=DSQRT (1.-SINX2)
    COSX2=COSX*COSX
    SINCS=SINX*COSX
    ILQ=N*(L-1)
    IMQ=N*(M-1)
    DO 125 I=1,N
        IQ=(I*I-I)/2
        IF (I-L) 80,115,80
80  IF (I-M) 85,115,90
85  IM=I+MQ
    GO TO 95
90  IM=M+IQ
95  IF (I-L) 100,105,105
100 IL=I+LQ
    GO TO 110
105 IL=L+IQ

```

```
110 X=A(IL)*COSX-A(IM)*SINX
    A(IM)=A(IL)*SINX+A(IM)*COSX
    A(IL)=X
115 IF(MV-1) 120,125,120
120 ILR=ILQ+I
    IMR=IMQ+I
    X=R(ILR)*COSX-R(IMR)*SINX
    R(IMR)=R(ILR)*SINX+R(IMR)*COSX
    R(ILR)=X
125 CONTINUE
```

```
    X=2.*A(LM)*SINCS
    Y=A(LL)*COSX2+A(MM)*SINX2-X
    X=A(LL)*SINX2+A(MM)*COSX2+X
    A(LM)=(A(LL)-A(MM))*SINCS+A(LM)*(COSX2-SINX2)
    A(LL)=Y
    A(MM)=X
130 IF(M-N) 135,140,135
135 M=M+1
    GO TO 60
140 IF(L-N+1) 145,150,145
145 L=L+1
    GO TO 55
150 IF(IND-1) 160,155,160
155 IND=0
    GO TO 50
160 IF(THR-ANRMX) 165,165,45
165 IQ=-N
    DO 185 I=1,N
    IQ=IQ+N
    LL=I+(I*I-I)/2
    JQ=N*(I-2)
    DO 185 J=1,N
    JQ=JQ+N
    MM=J+(J*J-J)/2
    IF(A(LL)-A(MM)) 170,185,185
170 X=A(I)
```

```
A(LL)=A(MM)
A(MM)=X
IF(MV-1) 175,185,175
175 DO 180 K=1,N
    ILR=IQ+K
    IMR=JQ+K
    X=R(ILR)
    R(ILR)=R(IMR)
180 R(IMR)=X
185 CONTINUE
RETURN
END
```


C Ferromagneto de Heisenberg anisotropico con intercambio bicuadratico,
 C en aproximacion de pares de Oguchi. (spin = 1.)
 C J=1.=Intercambio; A=Intercambio Bicuadratico; D= Anisotropia.
 C DJ=D/J = d ** ; TJ= kt/J ; ** Z=8 Vecinos ** AMORFO -- OGUCHI
 C

```

    IMPLICIT REAL *8 (A-H,O-Z)
    COMMON /CERO/ A,DJ,TJ,S2,SZ,SUS,OSZ(9,9),OSZD(9,9),OSZSZ(9,9)
    OPEN(2,FILE='RDATA0.DAT',STATUS='OLD')
    READ (2,1) A,DJ,TJ,TJC,DELTA,S2,SG0,SGI,SXX
  1  FORMAT(2X,F4.2,3X,F5.1,3X,F5.2,4X,F5.2,5X,F4.2,4X,F4.2,3(5X,F4.2))
    WRITE (*,345) A,DJ
  345 FORMAT(10X,'A=',F5.2,10X,'DJ=',F6.2,10X,'OGUCHI - AMORFO',/)
    CLOSE (2)
    SUS=SXX
    NHUE=0
    ER=0.00001
    DO 10 IN=1,9
    DO 10 JN=1,9
    OSZ(IN,JN)=0.
  10 CONTINUE
    OSZ(1,1)= 2.
    OSZ(2,2)= 1.
    OSZ(4,4)=-1.
    OSZ(5,5)=-2.
    OSZ(6,6)= 1.
    OSZ(8,8)=-1.
    DO 11 IN=1,9
    DO 11 JN=1,9
    OSZD(IN,JN)=0.
  11 CONTINUE
    OSZD(1,1)=4.
    OSZD(2,2)=1.
    OSZD(4,4)=1.
    OSZD(5,5)=4.
    OSZD(6,6)=1.
    OSZD(8,8)=1.
    DO 12 IN=1,9
    DO 12 JN=1,9
    OSZSZ(IN,JN)=0.
  12 CONTINUE
  
```

```

OSZSZ(1,1)=1.
OSZSZ(3,3)=-0.333333
OSZSZ(3,9)=-0.471405
OSZSZ(9,3)=-0.471405
OSZSZ(5,5)=1.
OSZSZ(7,7)=-1.
OSZSZ(9,9)=-0.666666
15 CONTINUE
SG0=SG0
SG1=SG1
N=0
20 R=FUNSZ(SG0)
AR=DABS(R)
IF (AR.LT.ER) GO TO 30
P=FUNSZ(SG1)
AP=DABS(P)
IF (AP.LT.ER) GO TO 35
IF (P*R) 70,71,71
71 SG0=SG0/1.25
SG1=SG1+0.1

N=N+1
IF (N.LT.30) GO TO 20
GO TO 80
70 SG2=(AR*SG1+AP*SG0)/(AP+AR)
FSG2=FUNSZ(SG2)
IF (FSG2) 60,50,40
60 SG0=SG2
GO TO 20
40 SG1=SG2
GO TO 20
50 SZ=SG2
GO TO 100
80 SZ=0.
WRITE (*,81) TJ
81 FORMAT(2X,'TJ=',F6.2,5X,'NO se encuentra solucion para < Sz >.',/)
NHUE=NHUE+1
IF (NHUE.GT.5) STOP
GO TO 100

```

```
30 SZ=SG0
   GO TO 100
35 SZ=SG1
100 CONTINUE
150 ZG0=0.3
   ZG1=3.9
   NN=0
200 RR=FNSZ2(ZG0)
   ARR=DABS(RR)
   IF (ARR.LT.ER) GO TO 300
   PP=FNSZ2(ZG1)
   APP=DABS(PP)
   IF (APP.LT.ER) GO TO 350
   IF (PP*RR) 700,710,710
710 ZG0=ZG0/1.25
   ZG1=ZG1+0.1
   NN=NN+1
   IF (NN.LT.20) GO TO 200
   GO TO 800
700 ZG2=(ARR*ZG1+APP*ZG0)/(APP+ARR)
   FZG2=FNSZ2(ZG2)
   IF (FZG2) 600,500,400
600 ZG0=ZG2
   GO TO 200
400 ZG1=ZG2
   GO TO 200
500 Z2=ZG2
   GO TO 1000
800 WRITE (*,810) TJ,SZ
810 FORMAT(2X,'TJ=',F6.2,4X,'< Sz >=',F7.4,4X,'NO soluc. < Sz2 >')
   GO TO 105
300 Z2=ZG0
   GO TO 1000
350 Z2=ZG1
1000 CONTINUE
   DIF=DABS(S2-Z2)
   IF (DIF.LT.ER) GO TO 160
   S2=Z2
   GO TO 15
```

```

210 XR=FNS1S2(XG0)
    XRR=DABS(XR)
    IF(XRR.LT.ER) GO TO 310
    XP=FNS1S2(XG1)
    XPP=DABS(XP)
    IF(XPP.LT.ER) GO TO 360
    IF(XP*XR) 720,730,730
730 XG0=XG0/1.25
    XG1=XG1+0.1
    MS=MS+1
    IF(MS.LT.15) GO TO 210
    GO TO 820
720 XG2=(XRR*XG1+XG0*XPP)/(XPP+XRR)
    FXG2=FNS1S2(XG2)
    IF(FXG2) 610,510,410
610 XG0=XG2
    GO TO 210
410 XG1=XG2
    GO TO 210
510 X2=XG2
    GO TO 1010
820 WRITE (*,822) TJ,SZ,S2
822 FORMAT(2X,'TJ',F6.2,4X,'<Sz>',F7.4,4X,'<Sz 2>',F7.4,4X,'** NO **')
    GO TO 105
310 X2=XG0
    GO TO 1010
360 X2=XG1
1010 CONTINUE
    DYF=DABS(SUS-X2)
    IF(DYF.LT.ER) GO TO 5000
    SUS=X2
    GO TO 15
5000 G=SZ/2.
    WRITE(*,555) TJ,SZ,G,S2,SUS
555 FORMAT(2X,'TJ=',F6.2,4X,'<Sz>=',F7.4,4X,'G=',F7.4,4X,'<Sz 2>=',
    *F7.4,4X,'<S1zS2z>=',F7.4,/)
160 XG0=0.1
    XG1=1.
    MS=0

```

```
105 TJ=TJ+DELTA
    IF(TJC-TJ) 25,15,15
25 STOP
    END
```

```
FUNCTION FUNSZ (SUNO)
    IMPLICIT REAL *8 (A-H,O-Z)
    EXTERNAL FUND
    COMMON /CERO/ A,DJ,TJ,S2,SZ,SUS,OSZ(9,9),OSZD(9,9),OSZSZ(9,9)
    COMMON /UNO/ S1
    S1=SUNO
    CALL INSIM2 (FUND,0.,1.,0.,1.,10,10,VALUNO)
    FUNSZ=SUNO-VALUNO
    RETURN
    END
```

```
FUNCTION FUND (U1,U2)
    IMPLICIT REAL *8 (A-H,O-Z)
    COMMON /CERO/ A,DJ,TJ,S2,SZ,SUS,OSZ(9,9),OSZD(9,9),OSZSZ(9,9)
    COMMON /UNO/ S1
    DIMENSION H(45),AV(9,9),R(81),D(9),HAN(45)
    DO 14 IK=1,45
        H(IK)=0.
14 CONTINUE
        DMA=2.-A
        ASD=A*S2
        ASS=A*SUS
        H(1) =-2.*(1.+A)-7.*S1*DMA-21.*ASD+42.*ASS-28.*A
        H(3) =-2.*(1.+A)-3.5*S1*DMA+10.5*ASD-21.*ASS-70.*A
        H(6) =-2.*(1.+A)+21.*ASD-42.*ASS-84.*A
        H(10)=-2.*(1.+A)+3.5*S1*DMA+10.5*ASD-21.*ASS-70.*A
        H(15)=-2.*(1.+A)+7.*S1*DMA-21.*ASD+42.*ASS-28.*A
        H(21)= 2.*(1.-A)-3.5*S1*DMA-3.5*ASD+7.*ASS-14.*A
        H(28)= 2.*(1.-A)-7.*A*(4.-S2+2.*SUS)
        H(36)= 2.*(1.-A)+3.5*S1*DMA-3.5*ASD+7.*ASS-14.*A
        H(45)= 4.-8.*A
        U1C=U1*U1
        W1=DSORT(1.-U1C)
        W1C=1.-U1C
        U2C=U2*U2
```

W2=DSQRT(1.-U2C)
W2C=1.-U2C
HAN(1)=DJ*(W1C+W2C-4.)/2.
HAN(2)=DJ*(U1*W1+U2*W2)/2.
HAN(3)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(4)=-0.204124*DJ*(W1C+W2C)
HAN(5)=0.204124*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(6)=-0.166666*DJ*(3.*W1C+3.*W2C+4.)
HAN(7)=0.
HAN(8)=-DJ*(W1C+W2C)/4.
HAN(9)=-0.204124*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(10)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(11)=0.
HAN(12)=0.
HAN(13)=-0.204124*DJ*(W1C+W2C)
HAN(14)=-DJ*(U1*W1+U2*W2)/2.
HAN(15)=DJ*(W1C+W2C-4.)/2.
HAN(16)=-DJ*(U1*W1-U2*W2)/2.
HAN(17)=0.75*DJ*(W1C-W2C)
HAN(18)=0.612372*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(19)=-DJ*(W1C-W2C)/4.
HAN(20)=0.
HAN(21)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(22)=-0.353553*DJ*(U1C-U2C)
HAN(23)=0.353553*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(24)=0.
HAN(25)=0.353553*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(26)=-0.353553*DJ*(W1C-W2C)
HAN(27)=-0.353553*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(28)=DJ*(W1C+W2C-4.)/2.
HAN(29)=0.
HAN(30)=DJ*(W1C-W2C)/4.
HAN(31)=0.612372*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(32)=-0.75*DJ*(W1C-W2C)
HAN(33)=-DJ*(U1*W1-U2*W2)/2.
HAN(34)=DJ*(W1C+W2C)/4.
HAN(35)=0.353553*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(36)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(37)=-0.288675*DJ*(W1C+W2C)


```
HAN(38)=-0.57735*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(39)=0.235702*DJ*(3.*W1C+3.*W2C-4.)
HAN(40)=0.57735*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(41)=-0.288675*DJ*(W1C+W2C)
HAN(42)=0.

HAN(43)=0.
HAN(44)=0.
HAN(45)=-1.333333*DJ
DO 499 IM=1,45
H(IM)=H(IM)+HAN(IM)
499 CONTINUE
CALL EIGEN (H,R,9,0)
L=0
DO 99 M=1,9
L=L+M
99 D(M)=H(L)
DO 502 K=1,9
DO 501 I=1,9
501 AV(I,K)=R(9*(K-1)+I)
502 CONTINUE
TRAC=0.
PART=0.
DO 701 K=1,9
AD=DEXP(-D(K)/TJ)
DO 702 J=1,9
DO 702 I=1,9
702 TRAC=TRAC+AV(I,K)*OSZ(I,J)*AV(J,K)*AD
701 PART=PART+AD
FUNO=TRAC/PART
RETURN
END
```

```
FUNCTION FNSZ2 (HDOS)
  IMPLICIT REAL *8 (A-H,0-Z)
  EXTERNAL FDOS
  COMMON /CERO/ A,DJ,TJ,SZ,SZ,SUS,OSZ(9,9),OSZD(9,9),OSZSZ(9,9)
  COMMON /DOS/ H2
  H2=HDOS
  CALL INSIM2 (FDOS,0.,1.,0.,1.,10,10,VALDOS)
  FNSZ2=HDOS-VALDOS
  RETURN
  END
```

```
FUNCTION FDOS (U1,U2)
  IMPLICIT REAL *8 (A-H,0-Z)
  COMMON /CERO/ A,DJ,TJ,SZ,SZ,SUS,OSZ(9,9),OSZD(9,9),OSZSZ(9,9)
  COMMON /DOS/ H2
  DIMENSION HX(45),AX(9,9),RX(81),DX(9),HAN(45)
  DO 14 I=1,45
  HX(I)=0.
14 CONTINUE
  DMA=2.-A
  AHD=A*H2
  ASS=A*SUS
  HX(1) =-2.*(1.+A)-7.*SZ*DMA-21.*AHD+42.*ASS-28.*A
  HX(3) =-2.*(1.+A)-3.5*SZ*DMA+10.5*AHD-21.*ASS-70.*A
  HX(6) =-2.*(1.+A)+21.*AHD-42.*ASS-84.*A
  HX(10)=-2.*(1.+A)+3.5*SZ*DMA+10.5*AHD-21.*ASS-70.*A
  HX(15)=-2.*(1.+A)+7.*SZ*DMA-21.*AHD+42.*ASS-28.*A
  HX(21)= 2.*(1.-A)-3.5*SZ*DMA-3.5*AHD+7.*ASS-14.*A
  HX(28)= 2.*(1.-A)+7.*AHD-14.*ASS-28.*A
  HX(36)= 2.*(1.-A)+3.5*SZ*DMA-3.5*AHD+7.*ASS-14.*A
  HX(45)= 4.-8.*A
  U1C=U1*U1
  W1=DSORT(1.-U1C)
```

W1C=1.-U1C
U2C=U2*U2
W2=DSORT(1.-U2C)
W2C=1.-U2C
HAN(1)=DJ*(W1C+W2C-4.)/2.
HAN(2)=DJ*(U1*W1+U2*W2)/2.
HAN(3)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(4)=-0.204124*DJ*(W1C+W2C)
HAN(5)=0.204124*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(6)=-0.166666*DJ*(3.*W1C+3.*W2C+4.)
HAN(7)=0.
HAN(8)=-DJ*(W1C+W2C)/4.
HAN(9)=-0.204124*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(10)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(11)=0.
(12)=0.
HAN(13)=-0.204124*DJ*(W1C+W2C)
HAN(14)=-DJ*(U1*W1+U2*W2)/2.
HAN(15)=DJ*(W1C+W2C-4.)/2.
HAN(16)=-DJ*(U1*W1-U2*W2)/2.
HAN(17)=0.75*DJ*(W1C-W2C)
HAN(18)=0.612372*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(19)=-DJ*(W1C-W2C)/4.
HAN(20)=0.
HAN(21)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(22)=-0.353553*DJ*(U1C-U2C)
HAN(23)=0.353553*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(24)=0.
HAN(25)=0.353553*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(26)=-0.353553*DJ*(W1C-W2C)
HAN(27)=-0.353553*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(28)=DJ*(W1C+W2C-4.)/2.
HAN(29)=0.
HAN(30)=DJ*(W1C-W2C)/4.
HAN(31)=0.612372*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(32)=-0.75*DJ*(W1C-W2C)
HAN(33)=-DJ*(U1*W1-U2*W2)/2.
HAN(34)=DJ*(W1C+W2C)/4.
HAN(35)=0.353553*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(36)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.

```

HAN(37)=-0.288675*DJ*(W1C+W2C)
HAN(38)=-0.57735*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(39)=0.235702*DJ*(3.*W1C+3.*W2C-4.)
HAN(40)=0.57735*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(41)=-0.288675*DJ*(W1C+W2C)
HAN(42)=0.
HAN(43)=0.
HAN(44)=0.
HAN(45)=-1.333333*DJ
DO 499 IM=1,45
HX(IM)=HX(IM)+HAN(IM)
499 CONTINUE
CALL EIGEN (HX,RX,9,0)
L=0
DO 99 M=1,9
L=L+M
99 DX(M)=HX(L)
DO 502 K=1,9
DO 501 I=1,9
501 AX(I,K)=RX(9*(K-1)+I)
502 CONTINUE
TRAC=0.
PART=0.
DO 701 K=1,9
AD=DEXP(-DX(K)/TJ)
DO 702 J=1,9
DO 702 I=1,9
702 TRAC=TRAC+AX(I,K)*DSZD(I,J)*AX(J,K)*AD
701 PART=PART+AD
FDOS=TRAC/PART
RETURN
END

```

```

FUNCTION FNS1S2 (WAX)
IMPLICIT REAL *8 (A-H,O-Z)
EXTERNAL FTRES
COMMON /CERO/ A,DJ,TJ,S2,SZ,SUS,DSZ(9,9),DSZD(9,9),DSZSZ(9,9)
COMMON /TRES/ W
W=WAX

```

CALL INSIM2 (FTRES,0.,1.,0.,1.,10,10,VALTRE)

FNSTS2=MAX-VALTRE

RETURN

END

FUNCTION FTRES (U1,U2)

IMPLICIT REAL *8 (A-H,O-Z)

COMMON /CERO/ A,DJ,TJ,SZ,SZ,SUS,OSZ(9,9),OSZD(9,9),OSZSZ(9,9)

COMMON /TRES/ W

DIMENSION HY(45),AY(9),RY(81),DY(9),HAN(45)

DO 14 I=1,45

HY(I)=0.

14 CONTINUE

DMA=2.-A

ABD=A*S2

AWS=A*W

HY(1)=-2.*(1.+A)-7.*SZ*DMA-21.*ABD+42.*AWS-28.*A

HY(3)=-2.*(1.+A)-3.*SZ*DMA+10.*ABD-21.*AWS-70.*A

HY(6)=-2.*(1.+A)+21.*ABD-42.*AWS-84.*A

HY(10)=-2.*(1.+A)+3.*SZ*DMA+10.*ABD-21.*AWS-70.*A

HY(15)=-2.*(1.+A)+7.*SZ*DMA-21.*ABD+42.*AWS-28.*A

HY(21)=-2.*(1.-A)-3.*SZ*DMA-3.*ABD+7.*AWS-14.*A

HY(28)=-2.*(1.-A)+7.*ABD-14.*AWS-28.*A

HY(36)=-2.*(1.-A)+3.*SZ*DMA-3.*ABD+7.*AWS-14.*A

HY(45)=-4.-8.*A

UIC=U1*U1

W1=DSQRT(1.-UIC)

WIC=1.-UIC

U2C=U2*U2

W2=DSQRT(1.-U2C)

W2C=1.-U2C

HAN(1)=DJ*(WIC+W2C-4.)/2.

HAN(2)=DJ*(U1*W1+U2*W2)/2.

HAN(3)=-DJ*(WIC+W2C+4.)/4.

HAN(4)=-0.204124*DJ*(WIC+W2C)

HAN(5)=0.204124*DJ*(U1*W1+U2*W2)

HAN(6)=-0.166666*DJ*(3.*WIC+3.*W2C+4.)

HAN(7)=0.

HAN(8)=-DJ*(WIC+W2C)/4.

HAN(9)=-0.204124*DJ*(U1*W1+U2*W2)

HAN(10)=-DJ*(WIC+W2C+4.)/4.

HAN(11)=0.
HAN(12)=0.
HAN(13)=-0.204124*DJ*(W1C+W2C)
HAN(14)=-DJ*(U1*W1+U2*W2)/2.
HAN(15)=DJ*(W1C+W2C-4.)/2.
HAN(16)=-DJ*(U1*W1-U2*W2)/2.
HAN(17)=0.75*DJ*(W1C-W2C)
HAN(18)=0.612372*DJ**W1-U2*W2)
HAN(19)=-DJ*(W1C-W2C)/4.
HAN(20)=0.
HAN(21)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(22)=-0.353553*DJ*(U1C-U2C)
HAN(23)=0.353553*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(24)=0.
HAN(25)=0.353553*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(26)=-0.353553*DJ*(W1C-W2C)
HAN(27)=-0.353553*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(28)=DJ*(W1C+W2C-4.)/2.
HAN(29)=0.
HAN(30)=DJ*(W1C-W2C)/4.
HAN(31)=0.612372*DJ*(U1*W1-U2*W2)
HAN(32)=-0.75*DJ*(W1C-W2C)
HAN(33)=-DJ*(U1*W1-U2*W2)/2.
HAN(34)=DJ*(W1C+W2C)/4.
HAN(35)=0.353553*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(36)=-DJ*(W1C+W2C+4.)/4.
HAN(37)=-0.288675*DJ*(W1C+W2C)
HAN(38)=-0.57735*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(39)=0.235702*DJ*(3.*W1C+3.*W2C-4.)
HAN(40)=0.57735*DJ*(U1*W1+U2*W2)
HAN(41)=-0.288675*DJ*(W1C+W2C)
HAN(42)=0.
HAN(43)=0.
HAN(44)=0.
HAN(45)=-1.333333*DJ

DO 499 IM=1,45

HY(IM)=HY(IM)+HAN(IM)

499 CONTINUE

CALL EIGEN (HY,RY,9,0)


```

L=0
DO 99 M=1,9
L=L+M
99 DY(M)=HY(L)
DO 502 K=1,9
DO 501 I=1,9
501 AY(I,K)=RY(9*(K-1)+I)
502 CONTINUE
TRAC=0.
PART=0.
DO 701 K=1,9
AD=DEXP(-DY(K)/TJ)
DO 702 J=1,9
DO 702 I=1,9
702 TRAC=TRAC+AY(I,K)*OSZSZ(I,J)*AY(J,K)*AD
701 PART=PART+AD
FTRES=TRAC/PART
RETURN
END
SUBROUTINE INSIM2 (FUNCTI,A1,B1,A2,B2,J,K,RESULT)

```

```

C Subrutina que integra funciones de 2 variables, usando Simpson.
C FUNCTI=funcion que se integra, declarada EXTERNAL en el CALLING PROG.
C A1,B1 = Limites de la integral " de mas adentro " ( X ).
C A2,B2 = Limites de la integral " de mas afuera " ( Y ).
C J , K = Num. de partes en que se divide c/u de los respec. interv.
C RESULT= Resultado de la integral.
C

```

```

IMPLICIT REAL *B (A-H,O-Z)
K1=K+1

```

```
J1=J+1
FK=DBLE(K)
FJ=DBLE(J)
SUM=0.
DO 10 KKK=1,K1
KK=KKK-1
YKK=A2+DBLE(KK)*(B2-A2)/FK
KKB=ICDEF(KK,K)
DO 10 JJJ=1,J1
JJ=JJJ-1
XJJ=A1+DBLE(JJ)*(B1-A1)/FJ
JJA=ICDEF(JJ,J)
FTCN=FUNCTI(XJJ,YKK)
SUM=SUM+FTCN*DBLE(KKB)*DBLE(JJA)
10 CONTINUE
RESULT=(B2-A2)*(B1-A1)*SUM/(9.*FK*FJ)
RETURN
END
```

```
FUNCTION ICDEF(MM,M)
IMPLICIT REAL *8 (A-H,O-Z)
IF (MM.EQ.0.OR.MM.EQ.M) GO TO 40
FM=DBLE(MM)/2.
L=INT(FM)
RL=DBLE(L)
IF (RL-FM) 20,30,30
20 ICDEF=4
RETURN
30 ICDEF=2
RETURN
40 ICDEF=1
RETURN
END
```

REFERENCIAS

1. J.S. Smart; "Effective field theories of magnetism".
(Saunders, Philadelphie, 1966).
2. G. Rado y H. Suhl; "Magnetism". Vol. 1 (Academic, N.Y.
1963).
3. A.I. Gubanov; Fiz. Teverd. Tala 2, 502 (1960).
4. J.J. Rhyne, S.J. Pickart y H.A. Alperin; Phys. Rev. Lett.
29, 1562 (1972).
5. R. Harris, M. Plischke y M.J. Zuckermann; Phys. Rev. Lett.
31, 160 (1973).
6. A.E. Clark, H.S. Belson y N. Tamagawa; Phys. Lett. 42A,
160 (1972).
7. D.E. Polk; Acta Met. 20, 485 (1972).
8. R.W. Cochrane, R. Harris y M.J. Zuckermann; Phys. Rep.
(Rev. Section of Phys. Lett.) 48, 1 (1978).

9. P.W. Anderson; Phys. Rev. 115, 2 (1959).
10. N.L. Huang y R. Orbach; Phys. Rev. Lett. 12, 275 (1964).
11. G.A.T. Allan y D.D. Betts; Proc. Phys. Soc. (London) 91, 341 (1967).
12. R. Pintanel; "Sistema ferromagnético de Heisenberg, anisotrópico, con interacción bicuadrática".
Tesis para optar al grado de Licenciado en Ciencias con mención en Física; Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, 1982.
13. K.W.H. Stevens; Proc. Phys. Soc. (London) A65, 209 (1952).
14. B. Bleaney y K.W.H. Stevens; Rep. Progr. Phys. 16, 108 (1953).
15. A.R. Edmonds; "Angular momentum in quantum mechanics".
(Princeton Univ. Press; Princeton 1957).
16. W. Low; sol. Stat. Phys. supplement 3 (1960).
17. T. Oguchi; Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 13, 148 (1955).

18. P.W. Kasteleijn y J. van Kranendonk; *Physica* 22, 317 (1956).
19. M.E. Lines y E.D. Jones; *Phys. Rev.* 141, 525 (1966).
20. B. Strieb, H. Callen y G. Horwitz; *Phys. Rev.* 130, 1798 (1963).
21. H.A. Brown; *Phys. Rev.* B4, 115 (1971).
22. R. Ferrer y R. Pintanel; *Physica* 119B, 321 (1983).
23. M. Nauciel-Bloch, G. Sarma y A. Castets; *Phys. Rev.* B5, 4603 (1972).
24. R. Ferrer, M.J. Zuckermann, A.K. Bhattacharjee y B. Coqblin; *Phys. Lett.* 70A, 231 (1979).
25. J.G. Chakraborty; *J. Phys. c* 9, 1499 (1976).
26. N. Cruz; "Ferromagneto de Heisenberg con interacción bi-cuadrática y anisotropía uniaxial". Tesis para optar al grado de Magister en Ciencias Físicas; Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, 1985.
27. E.A. Harris y J. Owen; *Phys. Rev. Lett.* 11, 9 (1963).

28. D.S. Robdell, I.S. Jacobs, J. Owen y E.A. Harris; Phys. Lett. 11, 10 (1963).
29. M. Tiwari y R.N. Srivastava; Il Nuovo Cimento 58B, 323 (1980).
30. H.A. Brown; AIP Conference Proceedings (Editor: Hugh C. Wolfe) Número #10, parte #1, pág. 558 (Am. Inst. of Phys., N. York, 1973).