

# Comportamiento crítico de láminas ferromagnéticas ultradelgadas

Critical behaviour of ferromagnetic thin films

Santiago Alberto Pighín

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física como parte de  
los requerimientos para la obtención del grado de

Doctor en Física

Universidad Nacional de Córdoba

Agosto de 2009

©FaMAF-UNC 2009

Director: Sergio Alejandro Cannas



*a Luciana*



# Agradecimientos

A Sergio Cannas por todo el apoyo que me brindó en estos últimos años.

A las personas que colaboraron en forma directa con este trabajo: Orlando Billoni, Daniel Stariolo, Marianela Carubelli y Francisco Tamarit.

Al grupo de Teoría de la Materia Condensada.

A las instituciones que me permitieron llevar a cabo este proyecto: al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) y a la Facultad de Matemática, Astronomía y Física (FaMAF-UNC).

A mi familia, por su apoyo incondicional.

A todos los amigos y colegas que me acompañaron en esta etapa: Gonzalo Quintana, Alejandro Ferrón, Juan Perotti, Rodrigo Bürguesser, Santiago Gómez, Ezequiel Ferrero, Luis Foa Torres, Ernesto Danieli, Emilce Chacón, Lucas Nicolao, Beatriz Barzola, Federico Pont, Belén Franzoni, Germán Maglione, Carolina Tauro, Elena Rufeil, Gonzalo Álvarez, Sergio Altamirano, Candela Conforti, Hernán Muriel y Andrés Lanfranco.



## Resumen

Las láminas ferromagnéticas ultradelgadas son sistemas magnéticos caracterizados por una fuerte anisotropía uniaxial producto del confinamiento del sistema en una de sus direcciones. Ésta favorece el alineamiento de los momentos magnéticos de los átomos perpendicular al plano de la lámina. Un caso paradigmático de estos sistemas son las láminas generadas por deposiciones de hierro en cobre. El orden magnético de estos sistemas es de gran complejidad debido a la competencia entre las interacciones de intercambio y dipolar magnética a diferente escala espacial, además de la presencia de anisotropía. Todas estas propiedades dependen fuertemente de las condiciones de preparación de las muestras, de su espesor y temperatura. A bajas temperaturas, se observan dominios magnéticos perpendiculares de fajas. Éstas son dominios caracterizados por una modulación en una de las direcciones cristalinas. A medida que la temperatura aumenta el ancho de las fajas disminuye hasta alcanzar una transición de reorientación al plano o una transición a un estado desordenado dependiendo de los parámetros experimentales. Esta transición puede estar mediada por fases desordenadas que poseen simetría de rotación: una fase nemática, de simetría en  $\pi/2$  y una fase tetragonal, de simetría de rotación  $\pi/4$ .

En el presente trabajo se propone un modelo de espines clásicos en donde se tiene en cuenta la interacción de intercambio (responsable del ordenamiento ferromagnético), anisotrópica (responsable de los ejes de fácil magnetización) y dipolar magnética (responsable de la generación de dominios magnéticos) para explicar la fenomenología.

En la primera parte, el objeto de estudio son las propiedades magnéticas en el límite de alta anisotropía, donde el modelo propuesto queda expresado en términos de un *Hamiltoniano* de espines de *Ising* (dos estados). Un diagrama de fases detallado junto con un análisis de estabilidad es presentado para el caso de  $\delta$  pequeño, donde  $\delta$  es el cociente entre las intensidades de la interacción de intercambio y dipolar. De la comparación entre las predicciones de campo medio y Monte Carlo se deduce que las regiones en donde Monte Carlo predice la fase nemática, campo medio predice fajas híbridas, caracterizadas por combinación de dos o más anchos de faja. Por otro lado, Monte Carlo no muestra la dependencia del ancho de faja con la temperatura predicha por Campo Medio.

En la segunda parte se toma el modelo más general, representado por espines de *Heisenberg* (vector unitario). Un minucioso análisis del diagrama de fases a temperatura cero en función de  $\delta$  y  $\eta$  es expuesto, donde  $\eta$  es el cociente entre las intensidades de la anisotropía uniaxial por espín y la interacción dipolar. Este modelo presenta una transición de reorientación en donde la dirección preferencial de los espines rota de perpendicular a paralelo a la lámina. Para valores de  $\eta$  mayores a la reorientación, y en sentido creciente, existen regiones de fajas bien diferenciadas: una denominada canted, caracterizada por una componente de magnetización en el plano no nula dentro de los dominios y paredes suaves; una saturada, con dominios perpendiculares y paredes suaves y una fase Ising, sin componente de magnetización en el plano y paredes abruptas. Los resultados encontrados sugieren que las transiciones entre fajas que se observan experimentalmente se producen en la región saturada.

Un diagrama de fases ( $T, \eta$ ) es expuesto para el caso  $\delta = 6$ , donde  $T$  es la temperatura. Para alta anisotropía el sistema presenta el mismo comportamiento descrito en el modelo de espines de Ising. Para anisotropías intermedias se observa una transición de reorientación y dependencia del ancho de fajas con la temperatura como ha sido observado en los experimentos. Observamos que este modelo obedece a una ley de escala que permite extrapolar el diagrama de fases a valores arbitrarios de  $\delta$ , encontrando gran acuerdo con los resultados experimentales. Presentamos fuerte

evidencia de que las transiciones entre fajas están mediadas por la dinámica de dislocaciones y que esta dinámica se hace muy lenta al aumentar la anisotropía debido al costo energético de las paredes. Por último, realizamos algunas apreciaciones sobre el comportamiento de cuñas, donde obtenemos los mismos patrones de fajas observados en los experimentos.

**PACS:** 75.70.Kw, 75.40.Gb, 75.40.Mg, 75.40.Cx, 75.10.Hk

**Palabras Clave:** Simulaciones numéricas, Modelos de espines clásicos, Propiedades Dinámicas, Propiedades magnéticas de monocapas y láminas delgadas, Simulaciones de Monte Carlo, Interacciones Competitivas

# Abstract

Ferromagnetic ultrathin films are characterized by a strong uniaxial anisotropy due to the presence of an interface. This may favor a perpendicular alignment of the magnetic moments within the film. An example of this system is the film obtained by the deposition of Fe on a Cu substrate. Competition between the short-range exchange interaction and long-range dipolar interaction plus the action of anisotropy generate complex magnetic order. Thin films magnetic properties are strongly dependent on preparation conditions, thickness and temperature. At low temperatures, the system presents stripes, characterized by a modulation of the perpendicular magnetization in one direction only. When the temperature is increased, the stripes become narrower up to a transition into a ferromagnetic in-plane state or to a disordered state depending on experimental parameters. The disordering process can be mediated by two disordered phases, the nematic, with  $\pi/2$  rotational symmetry, and the tetragonal liquid, with  $\pi/4$  rotational symmetry.

In the first part, we study the thin-films magnetic properties in the limit of high anisotropy, where the system is described by an *Ising* with short and long range interactions. We present a detailed calculation of the  $(\delta, T)$  phase diagram,  $\delta$  being the ratio between exchange and dipolar interaction intensities and  $T$  the temperature. We compare the results of both mean field approximation and Monte Carlo numerical simulations in the region of low values of  $\delta$ . We found that, in the regions of the phase diagram where Monte Carlo simulations display nematic order, the mean field approximation predicts hybrid solutions composed by stripes of different widths. Another remarkable qualitative difference between both calculations is the absence, in this region of the Monte Carlo phase diagram, of the temperature dependency of the equilibrium stripe width predicted by the mean field approximation.

In the second part, we propose a *Heisenberg* model to account for the behavior at intermediate anisotropies. We calculate the complete zero temperature  $(\delta, \eta)$  phase diagram,  $\eta$  being the ratio between anisotropy and dipolar interaction intensities. Increasing the value of  $\eta$  through the reorientation phase transition we find three different stripes solutions: a canted phase, with non-zero in-plane magnetization within the domains; a saturated phase, characterized by zero in-plane magnetization within the domains and nonzero within the domains walls; and *Ising* stripes, with zero in-plane magnetization and sharp walls.

We also present a detailed calculation of the  $(T, \eta)$  phase diagram with  $\delta = 6$ . We find that the limit of high  $\eta$  values is consistent with the results obtained with the *Ising* model. We observe the reorientation phase transition and stripe width dependence with temperature. The phase diagram presents a scaling law and can be extrapolated to arbitrary values of  $\delta$ , obtaining a good agreement with experiment. We find that the mechanism mediating stripe width transitions is the dislocation dynamic. This dynamic becomes slower at high  $\eta$  values. Finally, we simulate wedges appreciating the same phenomenology as experimental systems.

**PACS:** 75.70.Kw, 75.40.Gb, 75.40.Mg, 75.40.Cx, 75.10.Hk

**Keywords:** Numerical simulation studies, Classical spins models, Dynamics Properties, Magnetic properties of monolayers and thin films, Monte Carlo Simulations, Competitive Interactions



# Índice general

|            |  |           |
|------------|--|-----------|
| <b>I</b>   | <b>Introducción</b>  | <b>15</b> |
| 1.         | Introducción al presente trabajo                                 | 17        |
| 2.         | Formación de patrones en películas ferromagnéticas ultradelgadas | 19        |
| 2.1.       | Resultados experimentales  | 20        |
| 2.1.1.     | Fabricación y medición   | 20        |
| 2.1.2.     | Propiedades estructurales del hierro en cobre                    | 21        |
| 2.1.3.     | Propiedades magnéticas   | 22        |
| 2.2.       | Resultados teóricos previos                                      | 29        |
| 2.2.1.     | Energías relevantes  | 29        |
| 2.2.2.     | Temperatura cero   | 31        |
| 2.2.3.     | Temperatura finita   | 32        |
| 2.2.4.     | Anisotropías intermedias   | 36        |
| <b>II</b>  | <b>Diagrama de fases del modelo de <i>Ising</i> dipolar</b>      | <b>37</b> |
| 3.         | Campo Medio  | 41        |
| 3.1.       | Espacio de Fourier   | 41        |
| 3.2.       | Análisis de estabilidad  | 45        |
| 3.3.       | Diagrama de fases  | 47        |
| 4.         | Monte Carlo  | 49        |
| 4.1.       | Condiciones de contorno  | 50        |
| 4.2.       | Temperatura crítica  | 50        |
| 4.3.       | Análisis de estabilidad  | 51        |
| 4.4.       | Líneas de transición   | 54        |
| 4.5.       | Temperatura de transición fajas-nemática                         | 57        |
| <b>III</b> | <b>Diagrama de fases del modelo de <i>Heisenberg</i> dipolar</b> | <b>61</b> |
| 5.         | Diagrama de fases a temperatura cero                             | 65        |
| 5.1.       | Energía de los perfiles de faja                                  | 65        |
| 5.2.       | Diagrama de fases para valores de $\delta$ pequeños              | 67        |
| 5.3.       | Diagrama de fases para valores de $\delta$ grandes               | 70        |

|  |            |
|--|------------|
| <b>6. Diagrama de fases a temperatura finita</b>   | <b>77</b>  |
| 6.1. Diagrama de fases para $\delta = 3$ . . . . .   | 77         |
| 6.2. Diagrama de fases para $\delta = 6$ . . . . .   | 79         |
| 6.2.1. Protocolos de simulación . . . . .  | 80         |
| 6.2.2. Diagrama de fases . . . . .   | 81         |
| 6.3. Diagrama de fases para $\delta$ arbitrario: escaleo de variables con $\delta$ . . . . . | 84         |
| 6.4. Variación del ancho de fajas . . . . .  | 89         |
| 6.4.1. Variación del ancho de fajas con la temperatura . . . . .                             | 90         |
| 6.4.2. Variación del ancho de fajas con la anisotropía . . . . .                             | 93         |
| 6.4.3. Simulación de láminas con espesor $d$ variable . . . . .                              | 97         |
| 6.4.4. Paredes, dislocaciones y vórtices . . . . .   | 101        |
| <b>7. Conclusiones</b>   | <b>107</b> |
| <b>A. Cálculo de <math>\hat{J}(\vec{k})</math>, Ec. (3.14)</b>                               | <b>111</b> |
| <b>B. Sumas de Ewald</b>   | <b>113</b> |
| B.1. Planteo general . . . . .   | 113        |
| B.2. Partición . . . . .   | 114        |
| B.3. Contribución de corto alcance . . . . .   | 114        |
| B.4. Contribución de largo alcance . . . . .   | 115        |
| B.5. Detalles de implementación . . . . .  | 119        |
| <b>C. Teoría de Yafet y Gyorgy, Ec. (5.2)</b>  | <b>123</b> |
| <b>D. Cálculo de la energía para valores de <math>\delta</math> pequeños</b>                 | <b>127</b> |
| <b>E. Minimización de la energía mediante simulaciones de Monte Carlo</b>                    | <b>129</b> |
| <b>F. Ecs. variacionales para perfiles con pared sinusoidal (PS) en el límite continuo</b>   | <b>131</b> |
| <b>G. Comportamientos asintóticos de la función <math>G(\Delta)</math></b>                   | <b>137</b> |
| <b>H. Energía de perfiles de magnetización con pared hiperbólica (PH)</b>                    | <b>141</b> |

# Índice de figuras

|  |    |
|--|----|
| 2.1. Esquema de funcionamiento del dispositivo SEMPA. . . . .  | 21 |
| 2.2. Lámina de fcc-Fe/Cu(100) . . . . .  | 22 |
| 2.3. Dependencia con la temperatura de la magnetización remanente para láminas de Fe/Cu(100) . . . . . | 24 |
| 2.4. Variación del ancho de fajas en Fe/Cu(100) y Fe/Ni/Cu(100) . . . . .                              | 26 |
| 2.5. Defectos topológicos en Fe/Cu(100) . . . . .  | 27 |
| 2.6. Lámina de Fe/Cu(100) de espesor variable . . . . .  | 28 |
| 2.7. Láminas de Co/Cu(6.6 ML)/Fe(2.7 ML)/Ni(5 ML)/Cu(001) . . . . .                                    | 29 |
| 2.8. Diagrama de fases a temperatura cero del modelo de <i>Heisenberg</i> dipolar . . . . .            | 33 |
| 2.9. Ancho de fajas en función de la temperatura . . . . .   | 34 |
| 2.10. Diagrama de fases del modelo de Ising . . . . .  | 35 |
| 3.1. Ancho de fajas en función de $\delta$ a $T = 0$ . . . . .   | 44 |
| 3.2. Líneas de estabilidad de las soluciones de faja con campo medio . . . . .                         | 46 |
| 3.3. Ejemplos de arreglos de fajas híbridas . . . . .  | 46 |
| 3.4. Diagrama de fases de campo medio . . . . .  | 47 |
| 3.5. Ramificación de fajas híbridas en la región de fajas $h = 2 - 3$ . . . . .                        | 48 |
| 4.1. Configuraciones típicas de las fases de faja, nemática y tetragonal . . . . .                     | 51 |
| 4.2. Región de estabilidad de las soluciones de faja . . . . .   | 52 |
| 4.3. Magnetización de fajas en función de la temperatura . . . . .                                     | 53 |
| 4.4. Evolución del espectro de los espines . . . . .   | 54 |
| 4.5. Factor de estructura de la fase nemática . . . . .  | 55 |
| 4.6. Configuración típica de espines en la fase nemática . . . . .                                     | 55 |
| 4.7. Procedimiento usado para calcular las líneas de transición entre fajas . . . . .                  | 56 |
| 4.8. Energía libre en función de la temperatura . . . . .  | 57 |
| 4.9. Calor específico y cumulante de cuarto orden en función de la temperatura . . . . .               | 58 |
| 4.10. Diagrama de fases obtenido con simulaciones de Monte Carlo . . . . .                             | 59 |
| 5.1. Perfil de magnetización con pared sinusoidal (PS) . . . . .                                       | 67 |
| 5.2. Esquema de la rotación de los espines en la pared . . . . .                                       | 68 |
| 5.3. Diagrama de fases a temperatura cero para valores de $\delta$ pequeños . . . . .                  | 69 |
| 5.4. Energía por espín para $\delta = 4,58$ . . . . .  | 70 |
| 5.5. Ángulo canted y ancho de fajas en función de la anisotropía . . . . .                             | 71 |
| 5.6. Ángulo canted y magnetización en el plano en función de la anisotropía . . . . .                  | 72 |
| 5.7. Perfil de magnetización de un estado saturado . . . . .   | 73 |
| 5.8. Diagrama de fases a temperatura cero para valores grandes de $\delta$ . . . . .                   | 75 |

|   |     |
|---|-----|
| 5.9. Ancho de fajas del perfil hiperbólico . . . . .  | 76  |
| 6.1. Diagrama de fases $(T, \eta)$ a $\delta = 3$ . . . . .   | 78  |
| 6.2. Diagrama de fases a $\delta = 6$ . . . . .   | 82  |
| 6.3. Magnetización en el plano y parámetro de orden de fajas en función de la anisotropía para $\delta = 6$ . . . . . | 84  |
| 6.4. Magnetización en el plano para $\delta = 3$ y $\delta = 6$ . . . . .   | 85  |
| 6.5. Comparación entre diagramas de fases teóricos y experimentales . . . . .   | 87  |
| 6.6. Leyes de escala . . . . .  | 88  |
| 6.7. Componentes de espín para distintas temperaturas . . . . .   | 91  |
| 6.8. Componentes de espín en sistemas con condiciones de contorno libres . . . . .                                    | 92  |
| 6.9. Dependencia del ancho de fajas con la temperatura . . . . .  | 93  |
| 6.10. Magnetización en el plano y parámetro de orden de fajas en función de la temperatura . . . . .                  | 94  |
| 6.11. Dinámica de dislocaciones en función de la anisotropía . . . . .  | 95  |
| 6.12. Correlación entre el ancho de fajas y la posición de las dislocaciones . . . . .                                | 96  |
| 6.13. Variación del ancho de fajas con la anisotropía . . . . .   | 98  |
| 6.14. Dependencia del ancho de faja con el espesor de la lámina . . . . .   | 99  |
| 6.15. Configuración de fajas en cuñas . . . . .   | 100 |
| 6.16. Variación del ancho de fajas en el diagrama de fases para $\delta = 6$ . . . . .                                | 101 |
| 6.17. Rotación de los espines de la pared . . . . .   | 102 |
| 6.18. Perfiles de magnetización $\langle S^z \rangle$ a temperatura $T = 0,5$ . . . . .                               | 103 |
| 6.19. Perfiles de magnetización para una lámina de Fe/Cu . . . . .  | 103 |
| 6.20. Dislocaciones . . . . .   | 104 |
| 6.21. Vórtices . . . . .  | 105 |
| G.1. Función $G(\Delta)$ . . . . .  | 139 |

# Parte I

## Introducción



# Capítulo 1

## Introducción al presente trabajo

El comportamiento de las láminas ferromagnéticas ultradelgadas ha adquirido gran importancia en los últimos 20 años. Varios hechos significativos contribuyeron en este proceso: el desarrollo de técnicas eficientes para producir y controlar la calidad de las muestras; el avance en materia de detectores y técnicas de medición y las potenciales aplicaciones tecnológicas en sistemas de almacenamiento de datos. La producción de estas láminas se realiza con la técnica de deposición epitaxial. Ésta genera materiales nuevos que no son posibles de estabilizar en bulk, lo que demanda nuevas teorías para explicar las propiedades observadas. A medida que los tamaños se hacen menores, se hace más necesaria la caracterización microscópica de los procesos magnéticos a nivel nanométrico. Las películas ferromagnéticas ultradelgadas son sistemas propicios para el estudio de propiedades fundamentales del magnetismo en dos dimensiones.

El orden magnético en láminas ferromagnéticas ultradelgadas es de gran complejidad debido a la competencia entre las interacciones de intercambio y dipolar magnética a diferentes escalas junto con la anisotropía cristalina de la muestra. Todas estas propiedades son fuertemente dependientes de las diferentes formas de preparación. No obstante la gran cantidad de resultados experimentales publicados, es todavía difícil llegar a conclusiones generales aún en cuestiones básicas, como el tipo de orden ferromagnético a bajas temperaturas. Es por ello que el análisis de modelos sencillos adquiere gran relevancia y este trabajo es una contribución en este sentido.

En el Cap. 2 se hace un compendio de los resultados teóricos y experimentales existentes en la literatura hasta la fecha. Describimos en forma detallada las propiedades de los sistemas magnéticos bidimensionales abarcados por los trabajos teóricos y experimentales, haciendo hincapié en las obtenidas por deposiciones Fe/Cu. En la segunda parte del trabajo abordamos la problemática de las láminas con fuerte anisotropía uniaxial. El modelo emergente para estos sistemas corresponde a un *Hamiltoniano* de *Ising* con interacciones dipolares magnéticas. En los Caps. 3 y 4 encontramos el diagrama de fases a temperatura finita en la aproximación de campo medio y mediante simulaciones de Monte Carlo respectivamente. En este último caso se analiza el problema de las condiciones de contorno en *Hamiltonianos* con términos de largo alcance. En el Cap. 7 comparamos las soluciones generadas por ambos métodos y exponemos las limitaciones del modelo. Estos resultados han sido publicados en la Ref. [1].

En la tercera parte presentamos los resultados para el modelo más general, éste corresponde a un *Hamiltoniano* de *Heisenberg* dipolar con anisotropía uniaxial y campo magnético externo. En el Cap. 5 presentamos el diagrama de fases a temperatura cero completo para todo el rango de parámetros del modelo. Los resultados de este capítulo se encuentran en la Ref. [2]. En el Cap. 6 estudiamos las propiedades térmicas de este sistema para todo el rango de parámetros y

analizamos el orden magnético ante variaciones de espesor. Una parte de estos resultados se han publicado en [3] y la otra será sometida en breve [4] Por último, en el Cap. 7 presentamos las conclusiones.

## Capítulo 2

# Formación de patrones en películas ferromagnéticas ultradelgadas

La existencia de fases moduladas debido a la competencia entre interacciones de corto y largo alcance abunda en la naturaleza. Su presencia se encuentra en sistemas en apariencia tan disímiles como láminas ferromagnéticas ultradelgadas [5], garnets ferrimagnéticos [6–8], superconductores [9], monocapas de Langmuir [10–12], sistemas químicos de reacción-difusión [13], fosfolípidos confinados en una interfase agua-aire [14], ferrofluidos, celdas de convección de Rayleigh-Bénard, copolímeros (diblock copolimers) [15].

Para cada caso se aplica un parámetro de orden que depende del problema, este puede ser una densidad de espines, densidad de carga, fracción volumétrica de algún compuesto, etc... Las escalas características de estos patrones varían desde cientos de angstroms hasta varios centímetros [15].

En este trabajo nos centraremos en el estudio de la fenomenología de un tipo particular de sistema que desarrolla modulaciones en la magnetización: las láminas ferromagnéticas ultradelgadas. El interés por estudiar el orden magnético en estos sistemas aparece con el desarrollo de las técnicas de crecimiento epitaxial (MBE, molecular beam epitaxy) y de sofisticados métodos de microscopía magnética [16], en especial, el avance tecnológico en materia de detectores de polarización [17]. El MBE es capaz de producir láminas de alta calidad con interfases abruptas y un buen control de espesor. Al depositarse, la sustancia sublimada adquiere una estructura cristalina compatible con la del sustrato. El resultado es un nuevo material con un orden distinto al que puede ser encontrado en forma aislada. Ejemplos de estas láminas son las deposiciones de Fe/Ag(001), Fe/Mo(110), Co/Au(111), Co/Ru(011) y Fe/Cu. También hay que mencionar a las láminas mixtas, que son de gran utilidad porque permiten un mayor control de las propiedades del sistema. Ejemplos de éstas son las deposiciones de (Fe/Ni)/Cu(001), Co/Cu/(Fe/Ni)/Cu(001) y Fe(111)/Ni/W(110).

A continuación haremos una breve síntesis del proceso de producción de estas láminas, de las propiedades estructurales y magnéticas. El hincapié será puesto en las láminas de Fe/Cu(100) ya que son un ejemplo paradigmático y sobre el cual hay más estudios realizados sobre sus propiedades magnéticas.

## 2.1. Resultados experimentales

### 2.1.1. Fabricación y medición

Una lámina de sustrato mecánicamente pulida (Cu(100), Ag(100), Au(111), W(110)) es sometida al bombardeo por iones de argón para remoción de impurezas. Mediante espectroscopía Auger (AES, Auger electron microscopy) es posible verificar el grado de pureza de la superficie. La superficie resultante es limpia pero rugosa por lo que es necesario un tratamiento térmico para suavizarla. El recocido (annealing) es llevado a cabo durante varios minutos y su efectividad es controlada por la calidad del patrón de difracción producido por electrones lentos (LEED, low energy electron diffraction).

Luego, se deja enfriar el sustrato hasta llegar a la temperatura de deposición. La lámina se sintetiza por medio de la técnica de crecimiento epitaxial (MBE, molecular beam epitaxy). Ésta consiste en la evaporación del elemento a depositar por calentamiento de alambres o bombardeo de un blanco del material. El elemento evaporado sublima sobre el sustrato a tasas muy bajas, de modo que copia la estructura cristalina del mismo. Debido a la baja tasa de deposición, el tiempo de exposición es prolongado, siendo necesarias condiciones de UHV para evitar la contaminación -principalmente debida a la presencia de oxígeno [18]. El crecimiento es monitoreado mediante la técnica RHEED (reflection high energy electron diffraction).

Si se interpone una máscara móvil entre el sustrato y el flujo de material sublimado, es posible generar muestras de espesor variable en forma de cuña. La principal ventaja de esta técnica es que permite comparar las propiedades magnéticas a diferentes espesores sobre una única muestra, independizando los resultados de las condiciones de preparación, cosa que es más difícil de lograr en preparaciones independientes. Las propiedades de las láminas varían sensiblemente con la temperatura de la deposición. Básicamente se pueden obtener dos tipos de láminas: las de baja temperatura y las de alta temperatura [19].

La caracterización de los patrones magnéticos se realiza con un microscopio electrónico de barrido con analizador de polarización (SEMPA, scanning electron microscope with polarization analysis) que consiste en un microscopio electrónico de barrido sumado a un detector de Mott (ver [20, Pág. 73] y referencias allí citadas). Este microscopio genera un haz de electrones de 10 – 100keV que incide en la muestra de donde son reemitidos dos clases de electrones: los electrones “escatereados” por los núcleos de la muestra (scattered back electrons) cuyas pérdidas de energía van de 0% a 20% y los electrones secundarios emitidos desde los átomos excitados por el haz, cuyas energías son menores a 50 eV. La polarización de los electrones secundarios está determinada por la magnetización del lugar donde fueron emitidos. Mediante dispositivos ópticos especiales, estos últimos son capturados y conducidos a un detector de Mott. Éste consiste en una lámina de oro que refleja los electrones de manera asimétrica dependiendo del estado de polarización de cada uno. Los electrones de cada haz son conducidos a diferentes detectores donde son contabilizados. De la diferencia normalizada entre las señales de uno y otro detector se obtiene el color del píxel correspondiente al lugar de incidencia del haz del microscopio. En la Fig. 2.1 se observa un esquema de funcionamiento: los electrones secundarios poseen polarizaciones  $S_1$  y  $S_2$  dependiendo de si la magnetización es up o down. En la Fig. 2.2 se observan dos imágenes de un sistema de fcc-Fe/Cu de 3 ML(monocapas): en **(a)** se grafica la suma de las señales  $S_1 + S_2$  de los detectores que provee información de la topografía de la muestra; en **(b)** se grafica la polarización, obtenida de la diferencia normalizada,  $(S_1 - S_2)/(S_1 + S_2)$ . De la comparación de las dos imágenes se puede conocer la dependencia de la magnetización con el sustrato.

Este método ofrece varias ventajas: por un lado, debido a que la magnetización se calcula con la diferencia normalizada de la polarización, es insensible a efectos estructurales; por otro, la alta resolución, limitada por el spot del microscopio electrónico ( $\sim 10\text{nm}$ ) y por el compromiso entre el tiempo de exposición y la intensidad de señal; por otra parte, como el camino libre medio de los electrones secundarios es pequeño, sólo son detectados los que provienen de las capas superiores y, por último, la conexión entre el espín y el vector magnetización de la muestra es directa. Con dos detectores se pueden diferenciar la componente perpendicular de la planar y con cuatro aislar cada una de las componentes.

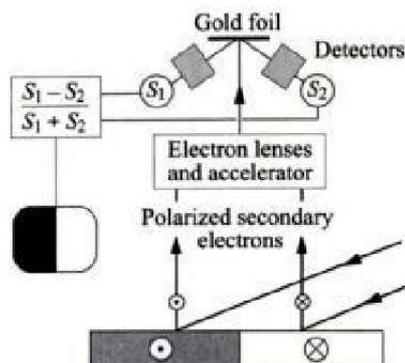


Figura 2.1: Esquema de funcionamiento del dispositivo SEMPA.

Asimismo, este método tiene algunas desventajas: la primera es el tiempo de exposición por píxel, que oscila entre 10 seg. a varios minutos debido a la baja eficiencia de los detectores de polarización; la segunda, es la destrucción de la polarización producida por el impacto de los electrones secundarios en su camino desde la muestra a los detectores. Éste es otro motivo por el cual son necesarias las condiciones de ultra-alto vacío. Para citar un ejemplo, en las mediciones de Portmann *et al.* [21] el tiempo por píxel es de 10 mseg y las fotos son de  $256 \times 256\text{px.}$ , dando un tiempo de medición de 11 min.

Más detalles de la técnica experimental se pueden encontrar en: Scheinfein *et al.* [23], Hubert *et al.* [20] y Freeman *et al.* [16].

### 2.1.2. Propiedades estructurales del hierro en cobre

Bajo condiciones normales de presión, el Fe volumétrico (bulk) posee un diagrama de fases muy rico y complejo, el cual puede ser resumido en la siguiente tabla:

| Nombre            | Estructura | Temperatura               | Orden magnético |
|-------------------|------------|---------------------------|-----------------|
| $\alpha$ -Fe      | bcc        | $T < 770\text{C}$         | ferromagnético  |
| $\beta$ -Fe       | bcc        | $770 < T < 912\text{C}$   | paramagnético   |
| $\gamma$ -Fe      | fcc        | $912 < T < 1394\text{C}$  | paramagnético   |
| $\delta$ -Fe      | bcc        | $1394 < T < 1538\text{C}$ | paramagnético   |
| fusión $T = 1538$ |            |                           |                 |

El hierro volumétrico (bulk) posee orden bcc (Fe- $\alpha$ ) a temperatura ambiente. Al depositarse sobre el substrato de cobre, adopta la estructura fcc del mismo. Jesser *et al.* observaron que

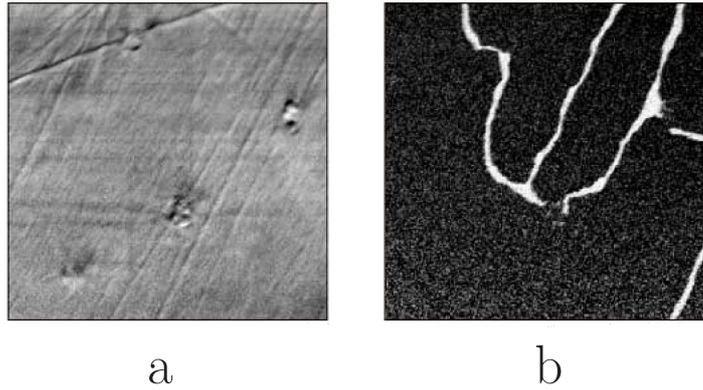


Figura 2.2: Lámina de fcc-Fe/Cu(100) de 3 ML de espesor generada por SEMPA. **(a)**  $S_1 + S_2$  brinda información de la topografía de la muestra. **(b)** polarización  $((S_1 - S_2)/(S_1 + S_2))$ . Del contraste blanco/negro de **(b)** se deduce que la componente de polarización es esencialmente perpendicular al plano. La imagen muestra como los dominios están anclados a los defectos de la muestra. Adaptado de Ref. [22].

este comportamiento se mantiene hasta un espesor de  $20\text{\AA}$ , luego del cual se observan centros de nucleación con orden bcc [24]. El hierro depositado adquiere el parámetro de red del cobre ( $a_{Cu} = 3,61\text{\AA}$ , muy similar al valor del  $\gamma$ -Fe). El cobre ejerce tensión sobre el hierro debido a que su parámetro de red es  $\sim 1\%$  mayor. Estas variaciones en la estructura del material afectan radicalmente las propiedades magnéticas. Moruzzi *et al.* [25] realizan cálculos *ab-initio* de energía en fcc-Fe volumétrico encontrando, en sentido creciente del parámetro de red del sustrato, un estado no magnético, uno antiferromagnético y otro ferromagnético. Estas transiciones son de primer orden y presentan variación del valor del momento magnético por átomo. Vemos entonces cómo las propiedades estructurales del material depositado dependen tanto del material depositado como del sustrato. Este proceso introduce cambios radicales en las propiedades magnéticas del sistema. Un análisis más detallado de la interdependencia del orden magnético con la estructura cristalina puede hallarse en Portmann [21].

### 2.1.3. Propiedades magnéticas

El magnetismo en los sólidos surge, a escala local, debido a la presencia de la interacción de intercambio entre átomos vecinos. Esta interacción es de origen puramente cuántico y tiene sus fundamentos en el principio de exclusión de Pauli. En los ferromagnetos, el intercambio favorece el alineamiento paralelo entre los momentos magnéticos de los átomos. Excepto para muestras con formas muy particulares, la alineación de todos los momentos genera energía magnetostática muy intensa debido a la interacción de largo alcance de los momentos dipolares. Esto se reduce dividiendo al sistema en porciones pequeñas de espines alineados, los dominios, que presentan distintas direcciones entre sí. Los dominios no pueden ser arbitrariamente pequeños ya que las paredes que los separan elevan la energía del sistema. A esto se suma la anisotropía producto de la red cristalina que favorece determinadas orientaciones de los dominios y que depende del material. Si el sistema estudiado posee una de sus dimensiones del orden de la monocapa, la modificación del número de vecinos de los átomos de la superficie genera una anisotropía superficial. uniaxial. Ésta compite con las interacciones ya mencionadas, razón por la cual las láminas ferromagnéticas

ultradelgadas poseen un comportamiento único que no es observado en sistemas tridimensionales de igual composición. La presencia de una interfase genera anisotropía uniaxial cristalina a causa de la disminución del número de primeros vecinos en las capas superiores de la lámina y la modificación de las hibridaciones de los átomos [26]. Este efecto sólo es notorio cuando la lámina es muy delgada, tanto como para equiparar las demás contribuciones a la energía. En el caso de las láminas ultradelgadas, la interacción dipolar genera una anisotropía que favorece la orientación de los espines en el plano. Según el material constitutivo de la lámina, la anisotropía superficial favorece la alineación perpendicular (anisotropía uniaxial perpendicular) o paralela a la lámina, como son los casos del hierro y del níquel respectivamente [27].

A temperaturas suficientemente bajas, una lámina de Fe/Cu(100) de 1 – 5 monocapas de espesor (ML) presenta orden ferromagnético en la dirección perpendicular [28]. A medida que el espesor aumenta, la dirección de magnetización rota al plano [29]. Esta transición es llamada transición de reorientación y es denotada como SRT (del inglés spin reorientation transition). El fenómeno de reorientación se da en varios tipos de láminas, variando el substrato y el elemento depositado. Esta propiedad se ha reportado en láminas de Fe/Ag(001) [30–32], Fe/Mo(110) [33], Co/Au(111) [34, 35], Co/Ru(011) [36], Fe/Cu<sub>3</sub>Au [37] y Fe/Cu [5]. También hay que mencionar las láminas mixtas, de gran utilidad ya que permiten tener mayor control sobre las propiedades del sistema, por ejemplo las deposiciones de (Fe/Ni)/Cu(001), Co/Cu/(Fe/Ni)/Cu(001) [38] y Fe(111)/Ni/W(110) [39, 40]. Propiedades similares han sido reportadas recientemente en láminas más gruesas de material amorfo, 25-1000 nm, Fe<sub>78</sub>B<sub>13</sub>Si<sub>9</sub> [41]. Asimismo existen láminas con magnetización perpendicular a bajas temperaturas que no presentan reorientación al plano. En función de las condiciones de preparación, las láminas de Fe/Cu(100) pueden o no exhibir reorientación. Ejemplos de estos dos casos se pueden ver en los trabajos de Allenshpach *et al.* [5] y de Vaterlaus *et al.* [42]). Pappas *et al.* miden la magnetización remanente en láminas de bcc-Fe/Ag(100) y fcc-Fe/Cu(100) depositadas a bajas temperaturas y encuentran que la transición del eje de fácil magnetización está mediada por una región aparentemente sin orden magnético [43, 44]. Obtienen, además, que la temperatura de reorientación disminuye sensiblemente con el espesor del film. La posible existencia de un régimen sin orden de largo alcance mediando entre dos regímenes ordenados generó gran controversia. En la Fig.2.3 se puede observar la magnetización remanente en función de la temperatura para dos láminas de 2,5 ML y 3 ML. Por medio de la técnica SEMP, haciendo uso de un microscopio electrónico con resolución lateral inferior a 0,5 nm, Allenspach *et al.* observan la formación de dominios perpendiculares en una lámina de Co/Au(111) de 3 ML de espesor [34]. La misma técnica es aplicada a una lámina de espesor variable de Fe/Cu(100) a 175 K. Para  $2,3 \text{ ML} < d < 5,3 \text{ ML}$  la magnetización es perpendicular al plano y en  $d_s = 5,3 \text{ ML}$  se observa la reorientación de los espines. Para  $d > 5,3 \text{ ML}$  la lámina ordena ferromagnéticamente en el plano. Luego sintetizan una lámina de espesor  $d_s$  sobre la que miden la magnetización perpendicular para varias temperaturas en el rango  $230 \text{ K} < T < 295 \text{ K}$ . En este experimento se observa la aparición de dominios prolados similares a fajas que se alinean con una de las direcciones cristalinas. El módulo de la magnetización espontánea demuestra que no hay reducción de los momentos magnéticos a lo largo de la cuña, por lo que el gap paramagnético mencionado por Pappas (Ref. [43]) se debe solamente a la presencia de dominios más pequeños que la resolución del instrumento. La presencia de dominios perpendiculares es reportado para diversas láminas: Fe/Cu<sub>3</sub>Au [37], Fe/Ni/W(110) [40] y Co/Cu/(Fe/Ni)/Cu(001) [38]. Trabajos más recientes logran capturar imágenes de alta resolución de la configuración magnética de las muestras en donde queda confirmada la existencia de fajas con magnetización perpendicular. Estos resultados se dan en gran variedad de láminas, independientemente de que presenten o no reorientación.

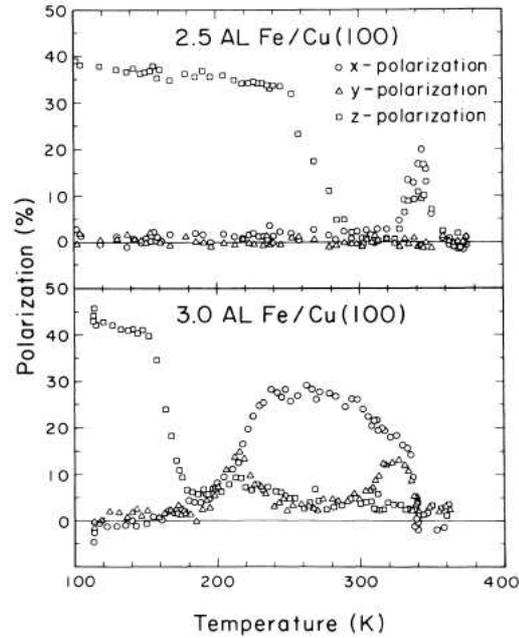


Figura 2.3: Dependencia con la temperatura de la magnetización remanente para láminas de Fe/Cu(100) de 2,5ML y 3 ML [43]

### Diagrama de fases

Un diagrama de fases parcial en las coordenadas  $(d, T)$  es obtenido por Qiu *et al.* para una lámina de Fe/Ag(100) [30, Fig. 5], donde  $d$  es el espesor de la lámina. El parámetro de orden utilizado para calcular las transiciones es la magnetización remanente planar y perpendicular medidas mediante efecto Kerr. Estos resultados son extendidos por Baudelet *et al.* mediante la misma técnica aplicada a una lámina de Fe/Cu<sub>3</sub>Au(100) [37, Fig. 4]. Diagramas cualitativamente similares son obtenidos para Fe(111)/Ni/W(110) [39, Fig. 3] y Fe/Ni/Cu(001) [45, Fig. 5]. En este trabajo exhibimos esos diagramas en la Fig. 6.5. Si bien son láminas de diferente material, los resultados son cualitativamente los mismos, lo que sugiere la existencia de un único modelo para explicar el comportamiento. En los diagramas se distinguen: una región de ordenamiento perpendicular de los espines a bajos valores de temperatura y espesor; una región de orden planar para bajas temperaturas y espesores grandes y una región paramagnética de alta temperatura. Las dos fases ordenadas están separadas por la línea de reorientación. Si se parte de la fase perpendicular, la reorientación puede ser alcanzada aumentando la temperatura o el espesor. Cada una de las fases ordenadas, a su vez, exhibe una transición a la fase paramagnética. La disminución de la temperatura de Curie para láminas muy delgadas puede tener varias razones: problemas de percolación estructural; disminución del momento magnético por acción de la interfase con el sustrato o la influencia de la anisotropía del sustrato. Ejemplo de este último caso son las láminas mixtas con níquel. La anisotropía uniaxial en el plano de este material permite disminuir el espesor al cual el hierro experimenta la reorientación. De esta manera se evita la nucleación de bcc-Fe que ocurre para  $d > 4$  ML (ver [21, Sec. 3.5.1]). En la lámina de Fe/Cu<sub>3</sub>Au, la disminución de la temperatura de transición va acompañada de una disminución del momento magnético del hierro

debido a hibridizaciones que se producen en la interfase y problemas de percolación estructural [37]. Sobre la fase perpendicular, cerca de la reorientación, se detecta la presencia de dominios magnéticos. En el trabajo de Won *et al.* se confirma la presencia de fajas mediante imágenes del sistema [45]. En el diagrama de fases correspondiente a la lámina de Fe/Ni/W(110) se aprecia una región intermedia entre las fases perpendicular y planar donde no hay remanencia. En este sentido, Won *et al.* reportan la existencia de un gap paramagnético entre las fase de fajas y la ferromagnética planar para la lámina de Fe/Ni/Cu(001) en ciertos rangos de temperatura [45]. Dada la resolución utilizada en la medición, este gap no presenta la misma fenomenología que el observado por Pappas *et al.* [43].

### Variación del ancho de fajas

Vimos en la sección anterior como la fase perpendicular está caracterizada por dominios de fajas. Pero, antes de pasar a describir con más detalle la fenomenología de esta fase haremos algunas consideraciones con respecto a la temperatura de Curie  $T_c$  de las láminas. Trabajando con láminas de Fe/Cu(100) sin reorientación, Portmann *et al.* encuentran que la temperatura de desorden es monotonamente creciente con el espesor de la lámina en la región de espesores pequeños, luego de lo cual aparece un máximo, cuya naturaleza no ha sido explicada [46]. El comportamiento de la temperatura de desorden con el espesor es muy importante, ya que las fases magnéticas que se observan en el sistema dependen de la distancia a la que se encuentra  $T_c$ . Como esta distancia se puede regular tanto con la temperatura real como con el espesor de la lámina, algunos grupos experimentales definen una temperatura efectiva de la forma  $\tau = T/T_c(d)$  y analizan el comportamiento de los dominios en función de  $\tau$ . Debido a la existencia de un máximo en  $T_c$ , es posible encontrar valores de  $T$  a los cuales el sistema presenta la secuencia de fases paramagneto-fajas-paramagneto a medida que se incrementa el espesor [42]. En las láminas compuestas de níquel se observa algo parecido, aunque sus causas son diferentes. En sentido creciente con el espesor de la lámina de hierro, se observan las fases ferromagnética en el plano seguida de fajas y vuelta a ferromagneto planar. En este caso, la primera reorientación se debe al efecto de la anisotropía planar del níquel que compite con la del hierro. En el segundo caso se debe a la competencia entre la anisotropía uniaxial del hierro y la energía dipolar [45].

El ancho de las fajas disminuye al acercarnos a la reorientación (o a la fase paramagnética según corresponda). Allesspach *et al.* es el primero en notar la fuerte dependencia del tamaño de los dominios con la temperatura en láminas de Fe/Cu con reorientación [5]. Portmann *et al.* calculan el ancho de fajas en función de la temperatura para una lámina sin reorientación de Fe/Cu(001) con espesor 1,95 ML. Cerca de la transición de desorden, el ancho sigue una ley de potencias de la forma  $h - h_{min} \propto (T - T_c)^2$ , en concordancia con una aproximación de campo medio [47] y con lo predicho por Czech *et al.* y Kashuba *et al.* acerca de la existencia de un ancho de fajas distinto de cero ( $h_{min} \neq 0$ ) sobre la línea de desorden [48, 49]. Para la misma lámina se ha medido la variación del ancho de dominios en todo en rango de temperaturas, como se puede ver en la Fig. 2.4a, extraída de [50]. En las ordenadas se grafica el ancho de fajas normalizado por el ancho de fajas sobre la temperatura de desorden. En las abscisas la temperatura normalizada de la misma manera. Los puntos negros corresponden a anchos registrados sobre fajas en equilibrio. Los puntos blancos corresponden a los anchos observados en la fase tetragonal. La región sombreada indica las temperaturas en donde el tiempo de medición es menor que el tiempo de equilibrio, por lo que los dominios allí observados son estados metaestables del sistema. Los dos ajustes realizados siguen la ley de potencias mencionada.

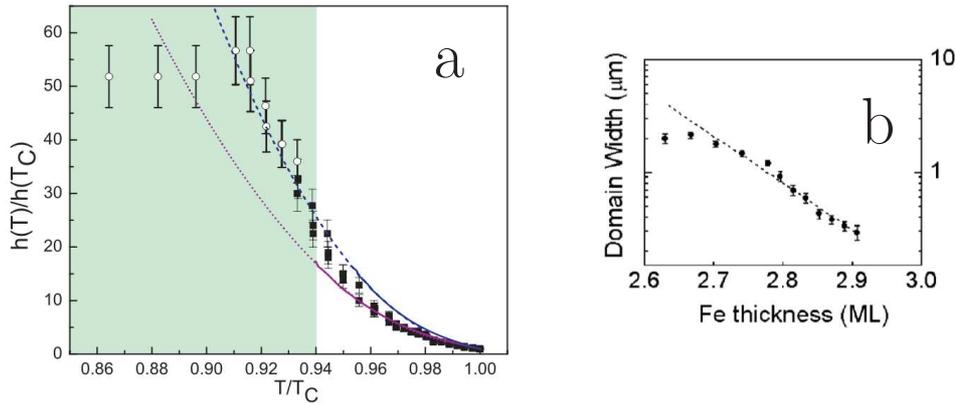


Figura 2.4: **(a)** Variación del ancho de fajas con la temperatura en Fe/Cu(100) [50]. Los ejes están normalizados por los valores correspondientes a la temperatura de desorden. Los puntos negros corresponden a anchos registrados sobre fajas en equilibrio. Los puntos blancos corresponden a los anchos observados en la fase tetragonal. La región sombreada indica las temperaturas en donde el tiempo de medición es menor que el tiempo de equilibrio, por lo que los dominios allí observados son estados metaestables del sistema. En líneas de puntos, dos ajustes realizados de acuerdo a los resultados de campo medio [47]. **(b)** Variación del ancho de fajas con el espesor de la capa de hierro en Fe/Ni/Cu(100) [45] graficado en escala logarítmica. La disminución del ancho de fajas exponencial se condice con los resultados obtenidos por medio de un modelo fenomenológico [38] aplicado a los resultados obtenidos a temperatura cero por Yafet *et al.* [51].

Por otro lado, Won *et al.* miden el ancho de fajas en función del espesor a temperatura ambiente para una lámina de Fe/Ni/Cu cerca de la reorientación. Sus mediciones muestran una reducción exponencial del ancho de fajas con el espesor de la lámina [45]. Este comportamiento es justificado mediante un modelo fenomenológico. La discrepancia existente entre estos resultados y los arriba mencionados hacen necesarios más estudios al respecto.

### Proceso de desorden de los dominios

El proceso de desorden que ocurre en los dominios es de gran complejidad. En principio, existen diferencias entre el comportamiento entre láminas dependiendo de si éstas presentan o no reorientación.

A bajas temperaturas es posible detectar la presencia de fluctuaciones térmicas (ver Ref. [42]) dadas por curvaturas en la pared a la manera de meandros (“meandering”) y por los cuatro defectos topológicos descritos en la teoría [52]. Éstos comprenden dos clases de dislocaciones (**a,b**), pasajes (**c**) e islas (**d**) (ver Inset y **A** en Fig. 2.5). Además, se detecta la presencia de defectos circulares y patrones tipo chevron (**B** y **C**) respectivamente, estos dos últimos no predichos por la teoría para films delgados, aunque comunes en láminas magnéticas más gruesas [7]. La manera más simple de estudiar cómo evoluciona el desorden con la temperatura es por medio de una lámina de espesor variable. En la Fig. 2.6 mostramos el patrón de magnetización perpendicular para una lámina de Fe/Cu con espesor 1,6 ML - 4 ML medida mediante la técnica SEMP, extraída de [42, Fig. 3]. La configuración **A** es tomada a temperatura ambiente. La región de fajas se encuentra al centro, rodeada de fase paramagnética. Se puede notar como la densidad de fajas aumenta a medida en

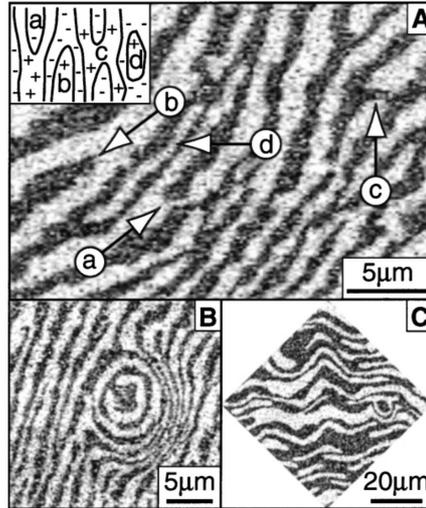


Figura 2.5: Defectos topológicos en una lámina de Fe/Cu(100) de  $2,6 \pm 0,6$  ML a temperatura ambiente. (A) Inset: cuatro clases de defectos topológicos según la descripción de Abanov *et al.* [52]. (a) dislocación que se inserta por arriba; (b) dislocación que se inserta por debajo; (c) pasaje generado por dos dislocaciones que se insertan desde afuera y (d) isla formada por dos dislocaciones que se insertan desde el centro. (B) defecto circular. (C) patrones “chevron”.

que se acerca la fase paramagnética. El sistema introduce nuevas fajas formando dislocaciones. En C se observa una ampliación del recuadro en donde se aprecia como las fajas comienzan a seguir caminos más tortuosos debido a las fluctuaciones térmicas. Disminuyendo la temperatura a  $T = 200K$  (B), esta región se expande. Una ampliación de la zona de transición D, revela la existencia de fajas que se curvan. Muchos de estos ángulos son de 90 grados, hecho que introduce una pequeña simetría tetragonal en el espectro de *Fourier* de la imagen (ver E). Éste se puede comparar con el espectro presentado en F, obtenido mediante un modelo de *Ising* dipolar [53] que también presenta evidencia de la fase tetragonal, tema que abordaremos en la Sec. 2.2.

Hasta donde sabemos, no hay evidencia experimental de la existencia de una transición entre la fase de fajas y la ferromagnética planar mediada por una fase tetragonal en láminas que presentan reorientación. En láminas de Fe/Ni/Cu(001) se observa un decrecimiento abrupto del ancho de fajas a medida que crece el espesor de la lámina hasta alcanzar la fase planar. Al igual que lo mencionado, a baja temperatura las láminas presentan fluctuaciones dadas por la curvatura de pared. El proceso por el cual las láminas disminuyen de ancho es la aparición de sucesivas dislocaciones a medida que se acerca la reorientación [45]. Como mencionamos, para algunas temperaturas es posible observar una fase paramagnética mediando entre las fajas y el ferromagneto planar, aunque los autores no descartan la posibilidad de existencia de fajas móviles que no son detectadas debido a la resolución temporal de la medición. El tiempo de adquisición para el método PEEM, el usado por los autores, oscila entre 10 – 100 segundos. En la Ref. [3] mostramos que el estado desordenado en dicha región podría corresponder a un estado tetragonal con alta movilidad. En láminas de Fe/Cu(001) sin reorientación, Portmann encuentra que la dinámica de dislocaciones es esencial para que el sistema alcance el estado de equilibrio [21]. Esto es observado no sólo en las cuñas, sino también al variar la temperatura en láminas homogéneas. Los dominios no varían en forma continua cuando la temperatura cambia. Un crecimiento continuo de los lados de las

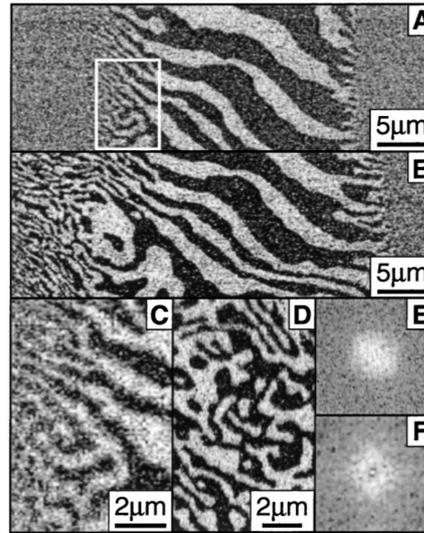


Figura 2.6: Lámina de Fe/Cu(100) de espesor variable en donde se aprecia el proceso de desorden. (A) imagen de una porción de lámina, los espesores van de 1,6 ML (borde derecho) a 4 ML (borde izquierdo) a temperatura ambiente. (B) La misma porción de sistema a temperatura  $T \approx 200$  ML. Sobre la transición, del lado izquierdo se observa la presencia de fuertes fluctuaciones en las fajas. (C) Ampliación del rectángulo señalado en (A). (D) Imagen de una región de fajas con curvaturas de 90 grados. (E) Espectro de *Fourier* de la región de alta fluctuación. (F) Espectro de *Fourier* de la fase tetragonal de Ref. [53].

fajas implicaría un movimiento de dominios a escala macroscópica, cosa que es imposible debido al anclaje que genera la red. Por lo tanto, la variación del ancho promedio en una muestra se debe a la continua migración de las dislocaciones a través de toda la muestra.

### Campo magnético

Es muy difícil aplicar microscopía electrónica al estudio del comportamiento magnético de las láminas ferromagnéticas ultradelgadas bajo la acción de un campo externo. Esto se debe a que el campo magnético desvía a los electrones. Una solución a este problema es la fabricación de sándwiches magnéticos [38]: sobre una lámina mixta de Fe/Ni se aplica una capa de Cu de espesor variable (2 – 10 ML). Por último se deposita una capa de cobalto. Este arreglo produce un acoplamiento entre las componentes planares de las láminas de Co y Fe/Ni que beneficia el alineamiento mutuo. Este acoplamiento hace las veces de campo magnético planar efectivo. Cuando la lámina de Fe/Ni presenta fajas, se observa que éstas se alinean según la dirección de la magnetización planar del cobalto. Esto indicaría con la existencia de paredes de *Bloch* entre los dominios de fajas, consistente con lo propuesto por Yafet *et al.* [51]. En la Fig. 2.7 mostramos las imágenes de una lámina de Co/Cu(6.6 ML)/Fe(2.7 ML)/Ni(5 ML)/Cu(001) discriminando la lámina de cobalto de la de Fe/Ni. Las flechas señalan la dirección de magnetización del cobalto.

Siempre bajo la suposición de que el acoplamiento es equivalente a la aplicación de un campo magnético externo, se puede observar que las fajas disminuyen de espesor al aumentar el campo. Este resultado es consistente: como la pared está alineada con el campo, la energía de la pared disminuye y el sistema incorpora más dominios. La regulación del campo se consigue al variar el

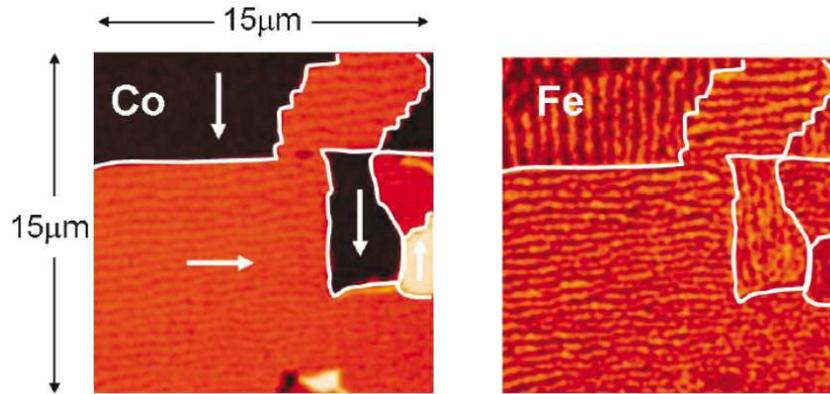


Figura 2.7: Imágenes de la magnetización del cobalto y el Fe/Ni en una lámina de Co/Cu(6.6 ML)/Fe(2.7 ML)/Ni(5 ML)/Cu(001). Las flechas señalan la dirección de magnetización del cobalto [38].

espesor de cobre que media entre las dos láminas.

La aplicación de un campo magnético con componente perpendicular previo a la medición genera la aparición de una fase de burbujas cerca de la transición de reorientación en láminas de Fe/Ni. La fase de burbujas se caracteriza por presentar dominios de magnetización perpendicular con forma circular. Este resultado se manifiesta sólo cuando el ángulo de incidencia del campo externo no sobrepasa los 10 grados con respecto a la superficie de la lámina [54]. Los patrones de burbujas son muy comunes en láminas magnéticas de mayor espesor [7] bajo la acción de un campo magnético perpendicular. Mediante la aproximación de Ginzburg-Landau aplicada a un modelo de Ising dipolar, Garel y Doniach predicen que la aplicación de un campo magnético perpendicular en sistemas de alta anisotropía produce una transición de primer orden entre las fases de fajas y de burbujas [55].

## 2.2. Resultados teóricos previos

### 2.2.1. Energías relevantes

El orden magnético de las láminas ferromagnéticas ultradelgadas está gobernado por la acción de varias interacciones. Las energías relevantes son: la energía de intercambio  $E_{int}$ , la energía dipolar  $E_{dip}$  y la energía de anisotropía  $E_{an}$ . También incluimos un término de campo magnético externo  $E_H$ , aunque aclaramos que en el presente trabajo no estudiamos las propiedades del sistema frente a campos magnéticos, éste sólo se usa como estrategia para equilibrar rápidamente las muestras.

Energía de intercambio: es el responsable de la existencia del orden ferromagnético en los materiales. Debido al principio de exclusión de Pauli y al carácter fermiónico de los electrones la función de onda debe ser antisimétrica. Esta energía aparece cada vez que existe un overlap entre electrones cercanos y puede ser expresada en términos de los valores de expectación de las componentes de espín de cada electrón. Como el overlap decrece rápidamente, esta interacción es

de corto alcance. En el modelo, la definimos como una interacción a primeros vecinos:

$$E_{int} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.1)$$

donde  $\vec{S}_i$  es el valor del espín del sitio  $i$  y  $J$  es el valor de la integral de intercambio. La suma contempla todas las interacciones a primeros vecinos sobre una red bidimensional cuadrada de tamaño  $L_x \times L_y$ . Cada espín puede tomar cualquier valor dentro de una esfera de radio 1. Este modelo se conoce con el nombre de modelo de *Heisenberg* clásicos.

Energía dipolar: también llamada energía magnetostática o energía de forma, por su dependencia con la forma del material. Si bien su magnitud es pequeña comparada con la interacción de intercambio, juega un rol esencial en la descripción de las propiedades magnéticas debido a que es un potencial de largo alcance. Es la responsable de la formación de dominios magnéticos. Está dada por la interacción dipolar entre los espines de la red:

$$E_{dip} = g \sum_{(i,j)} \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \quad (2.2)$$

donde  $\vec{r}_i$  denota la posición del sitio  $i$  y  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ . Esta interacción posee un primer término de características antiferromagnéticas y un segundo término que induce una anisotropía en la red, favoreciendo la orientación en el plano de los espines.

Energía de anisotropía: originada por las rupturas de simetría en la red cristalina debido al cambio en la distribución de vecinos, favorece una determinada dirección o plano de magnetización. Néel[26] es el primero en notar que este efecto es sumamente importante en las interfaces del sistema por lo que debe ser considerado en geometrías donde la relación superficie-volumen es pequeña, como ser el caso de alambres o láminas ultradelgadas. En el caso de láminas, favorece una orientación perpendicular o paralela a la red dependiendo de los materiales utilizados en el experimento y de la forma en que la muestra es generada:

$$E_{an} = -K \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2, \quad (2.3)$$

donde  $N = L_x \times L_y$  es el número total de espines en la red. En los materiales que estudiamos la anisotropía de superficie favorece la orientación perpendicular a la red,  $K > 0$ , de esta manera compete con el segundo término de (2.2).

Energía por campo magnético: producida por la presencia de un campo magnético. En el presente trabajo definimos como  $z$  la dirección perpendicular a la red y como  $x, y$  las coordenadas en el plano. En el presente trabajo, los campos son aplicados en la dirección  $x$ , por lo tanto la expresión para la energía es:

$$E_H = -H^x \sum_{i=1}^N S_i^x. \quad (2.4)$$

Para facilitar el análisis del sistema, rescalamos todas las interacciones por un factor  $g$ , de esta manera obtenemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\delta \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{(i,j)} \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \\ & - \eta \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 - \xi \sum_{i=1}^N S_i^x \end{aligned} \quad (2.5)$$

### 2.2.2. Temperatura cero

#### Límite de alta anisotropía

Como mencionamos en 2.1, dependiendo del tipo de lámina ferromagnética ultradelgada y de su proceso de fabricación se puede configurar las propiedades magnéticas de las láminas. Un caso particular lo representan las láminas que no presentan transición de reorientación debido a la existencia de una fuerte anisotropía en el sentido perpendicular a la lámina [42]. En el límite de  $\eta \rightarrow \infty$  el *Hamiltoniano* Ec. (2.5) queda expresado en términos de un modelo de *Ising* dipolar:

$$\mathcal{H} = -\delta \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \sum_{(i,j)} \frac{S_i S_j}{r_{ij}^3} \quad (2.6)$$

donde ahora los espines se reducen a los valores  $S_i = \pm 1$ . Notar que la componente planar de la interacción dipolar es idénticamente nula y sólo permanece la contribución antiferromagnética.

La competencia entre la energía de intercambio y la dipolar generan un estado de dominios para cualquier valor de  $\delta$ . Para probar esto, hay que notar que un estado perpendicular monodominio es desestabilizado por la introducción de una pared [56]. Analizando este sistema, Czech y Villain encuentran que un estado de dominios es energéticamente más favorable que un estado monodominio para valores suficientemente grandes de  $\delta$  [48]. Sin embargo, llegan a la errónea conclusión de que un estado de dominios cuadrados (similar a un tablero de ajedrez), posee menor energía que un estado de fajas. Esta discrepancia es resuelta por Kaplan y Gehring quienes encuentran que un estado de fajas siempre tiene menor energía que uno tipo tablero de ajedrez [57]. Kashuba y Pokrovsky confirman, sobre un modelo continuo, que el estado de fajas es la configuración de menor energía sobre estados con dominios cuadrados y triangulares [58]. MacIsaac *et al.* muestran que el estado fundamental es un estado de fajas para  $\delta > \delta_c$ , con  $\delta_c \approx 0,425$  [59] sobre una red discreta de espines [60]. Si  $\delta < \delta_c$  el estado fundamental corresponde a un estado antiferromagnético. Si  $\delta > \delta_c$  el estado fundamental está compuesto por fajas antialineadas de ancho  $h$ , que depende de  $\delta$ . MacIsaac *et al.* muestran que para todo valor de  $\delta > \delta_c$  existe un valor de  $h$  tal que las fajas correspondientes tienen menor energía que un estado ferromagnético perpendicular o un estado de dominios cuadrados. En otras palabras, la presencia de la interacción dipolar, aún con intensidad infinitesimal, suprime el orden ferromagnético monodominio favoreciendo la formación de fajas. Además, MacIsaac *et al.* muestran que el ancho de las fajas crece exponencialmente con la interacción de intercambio reescalada  $h \sim e^{\delta/2}$ .

#### Anisotropías intermedias

En el caso de valores de anisotropía intermedios es necesario considerar todos los términos del *Hamiltoniano* de Heisenberg (2.5). En este caso, a la competencia entre los términos de intercambio y dipolar antiferromagnético es necesario agregar la competencia entre la anisotropía uniaxial y el término dipolar anisotrópico. La interacción dipolar anisotrópica favorece el alineamiento de los espines en el plano en contraposición con la anisotropía uniaxial. Un análisis detallado de lo que sucede en este caso es presentado por Yafet y Gyorgy [51]. Ellos consideran fajas rectas separadas por paredes de *Bloch* que se caracterizan por la rotación de los espines sobre un eje perpendicular a la pared (este tipo de pared demuestra tener menor energía que las paredes tipo Néel, en donde el eje de rotación es paralelo a la pared [56, 61]). Con esta configuración, la energía del sistema se mapea de manera exacta en la de un modelo unidimensional. Éste depende exclusivamente del perfil de magnetización perpendicular a lo largo de la coordenada perpendicular

a la dirección de las fajas (ver Cap. 5). Entonces, considerando un perfil con paredes sinusoidales como el que se muestra en la Fig. 5.1, obtienen una energía que depende de tres parámetros variacionales (ver Apéndice C): el ancho de fajas  $h$ , el ancho de pared  $w$  y la magnetización en el interior de los dominios  $M_0$ . Trabajando en el límite del continuo, el cual tanto  $h$  como  $w$  son mucho mayores que el espaciado interatómico, los autores encuentran que existe un valor mínimo de la constante de anisotropía  $\eta_{SRT}$ , donde  $\eta_{SRT}$  depende de  $\delta$ , tal que: para  $\eta < \eta_{SRT}$  el sistema ordena ferromagnéticamente en el plano y para  $\eta > \eta_{SRT}$  el sistema presenta dominios de fajas perpendiculares. Ésta es la transición de reorientación que mencionamos en la Sec 2.1. Por encima de la reorientación, el ancho de fajas crece exponencialmente con  $\eta$ . Mediante la misma cuenta se puede deducir que la magnetización perpendicular de los dominios,  $M_0$ , satura rápidamente en 1 para valores de  $\delta$  suficientemente grandes [56]. Los estados de fajas caracterizados por presentar componente planar ( $M_0 \neq 1$ ) son los denominados estados canted. En el presente trabajo extendemos la teoría de Yafet y Gyorgy (YG) para obtener de forma exacta el diagrama de fases a temperatura cero (estado fundamental) en el espacio **completo** de parámetros  $(\delta, \eta)$ . En particular, mostramos los límites de validez de la teoría YG.

Comparando numéricamente las energías de los estados de fajas, ferromagnético planar, antiferromagnético y el estado fundamental correspondiente a la interacción dipolar, MacIsaac *et al.* obtienen un diagrama de fases a temperatura cero en el espacio  $(\delta, \eta)$  para valores pequeños de  $\delta$  [62] (ver Fig. 2.8). Para baja anisotropía uniaxial se observa la presencia de la fase ferromagnética en el plano. Las fases perpendiculares corresponden a fajas siempre y cuando  $\delta > \delta_c$ . Para valores suficientemente bajos de la constante de intercambio y la anisotropía, el sistema está dominado por la interacción dipolar, cuyo estado fundamental es antiferromagnético en el plano e infinitamente degenerado [63]. Notar que la expresión para la energía de fajas utilizada en este trabajo corresponde a la energía de fajas Ising, i.e., son fajas que no poseen componente de magnetización en el plano ( $M_0 = 1$ ) y cuyas paredes son abruptas, dadas por el cambio en el valor del espín de  $-1$  a  $1$ . Trabajando sobre el modelo discreto, Whitehead *et al.* encuentran que una fase de fajas canted tiene menor energía que una fase de fajas Ising cerca de la transición de reorientación para  $\delta = 4,45$  [64]. El diagrama de fases obtenido por MacIsaac *et al.* [62] resulta por lo tanto incompleto, ya que no lleva en consideración los estados canted. Además, el diagrama de fases de Fig. 2.8 sólo considera valores pequeños de  $\delta$  mientras que valores realistas en láminas de Fe/Cu arrojan valores de  $\delta \sim 100$  (ver Cap. 5). Si bien la teoría YG resulta aplicable para valores grandes de  $\delta$ , como veremos en el Cap. 5, la misma sólo resulta válida en las inmediaciones de la transición de reorientación. Finalmente, Whitehead *et al.* [64] muestran que los estados canted presentan una fuerte variación del ancho  $h$  con la anisotropía. Sin embargo, Politi reporta, en base a la teoría YG, que la fase canted sólo sería detectable en un intervalo despreciable de valores de la anisotropía y, por ende, no observable experimentalmente [56]. Resulta entonces de enorme importancia dilucidar estos resultados controversiales obteniendo un diagrama de fases a temperatura cero preciso, así como determinar la relación entre la variación del ancho de fajas con la anisotropía y los estados canted.

### 2.2.3. Temperatura finita

#### Alta anisotropía

Las principales dificultades para el tratamiento del modelo expuesto, tanto en su versión general como en el límite de altas anisotropías, están dadas por el término de largo alcance de la interacción

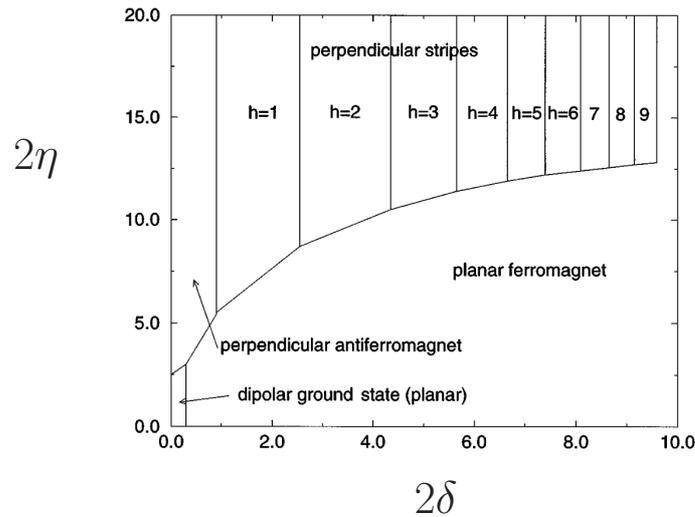


Figura 2.8: Diagrama de fases a temperatura cero del modelo de *Heisenberg* dipolar extraído de la Ref. [62].

dipolar y la frustración que produce la competencia entre las interacciones. Por lo tanto, cualquier aproximación, tal como el campo medio, arroja un número infinito de ecuaciones acopladas. Éstas sólo se pueden resolver en caso muy puntuales. Czech y Villain derivan una expresión exacta de la temperatura crítica entre la fase desordenada y una fase modulada [48] para la Ec. (2.6). También encuentran que el ancho de fajas sobre la temperatura crítica es finito y está dado por  $h(\delta) \approx \delta$ . Comparando estos resultados con el comportamiento exponencial esperado a temperatura cero nos estarían indicando una fuerte dependencia del ancho de fajas con la temperatura.

Para temperaturas inferiores a la temperatura crítica, es necesario introducir un ansatz para lograr resolver las ecuaciones o aplicar algún método numérico. Mediante una aproximación realizada sobre las ecuaciones de campo medio del modelo de *Ising* dipolar, Portmann *et al.* encuentran que  $h$  se aproxima al valor de  $\delta$  sobre la temperatura crítica  $T_c$  de la forma  $h(T) \approx (T - T_c)^2$  [21, 47].

Restringiendo las soluciones de campo medio a aquellas que presentan fajas, Vindigni *et al.* obtienen el comportamiento del ancho de fajas para todo el rango de temperaturas [65]. Ellos encuentran que el comportamiento a temperaturas cercanas a la temperatura de transición sigue una ley de potencias con exponente 1,9. A temperaturas menores el comportamiento es distinto, encontrándose una dependencia de  $h$  más pronunciada. Estos resultados se pueden ver en la Fig. 2.9. Notar la semejanza entre esta función y la obtenida en los trabajos experimentales (ver Fig. 2.4).

Un detallado análisis de campo medio es realizado por Grousson *et al.* para un modelo de *Ising* con interacciones coulombianas [66]. Este modelo guarda muchas similitudes con el modelo dipolar en el sentido de que posee interacciones de largo alcance que frustran el sistema y le impiden la formación de un estado ferromagnético. Ellos calculan el diagrama de fases a temperatura finita y observan la formación de fajas a bajas temperaturas. Cerca de la transición a un estado desordenado, encuentran proliferación de fajas híbridas, resultado de la combinación de varios anchos de faja.

Uno de los trabajos teóricos fundamentales en el área es presentado por Kashuba y Pokrovsky

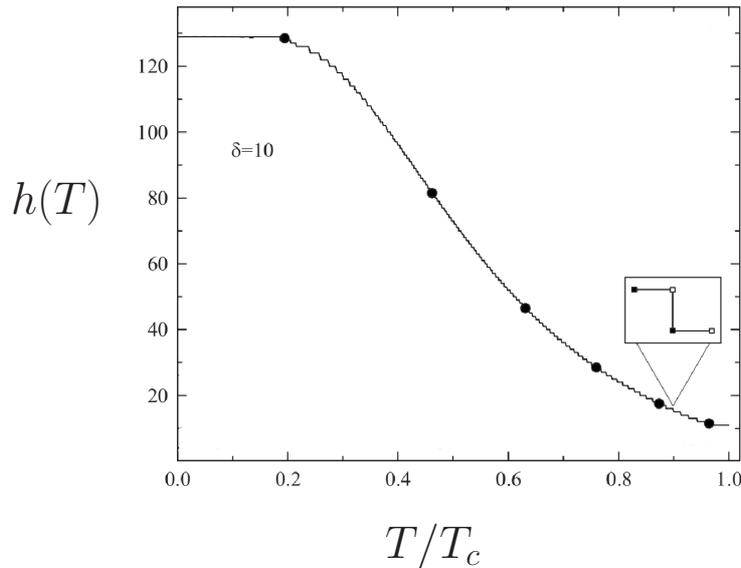


Figura 2.9: Ancho de fajas en función de la temperatura calculado mediante campo medio, extraído de la Ref. [65]. La curva no es suave debido a que el ancho de fajas está calculado sobre una red discreta.

[49, 58]. Sobre la versión continua del *Hamiltoniano* (2.5) (ver referencias), ellos encuentran que los dominios de fajas pueden ser descritos como un cristal líquido. El orden de fajas corresponde a una fase esméctica caracterizada por poseer orden orientacional de largo alcance sin orden posicional, que es destruido por dos tipos de fluctuaciones: curvatura de pared (“meandering”) y dislocaciones. Este estado se caracteriza por poseer correlaciones espaciales que decaen algebraicamente y se distinguen con la sigla QLRO (quasi long range order). Sobre la misma idea, Abanov *et al.* encuentran que el proceso de desorden puede presentar dos escenarios posibles que describiremos a continuación [52]. En el primero, una fase esméctica aparece a bajas temperaturas. Esta fase soporta los dos tipos de fluctuaciones mencionadas. A mayor temperatura, la proliferación de dislocaciones destruyen el QLRO por medio de una transición de Kosterlitz-Thouless a una fase nemática. Ésta está caracterizada por un decaimiento exponencial de la correlación espacial. A temperaturas aún mayores, aparecen dominios de fajas perpendiculares entre sí, esta es la fase tetragonal. En el segundo escenario, el sistema no puede mantener la fase nemática y pasa de la fase esméctica a la tetragonal por medio de una transición de primer orden.

Muchas de las propiedades a temperatura finita de estos sistemas han sido obtenidas mediante soluciones numéricas de Monte Carlo en redes finitas aplicadas tanto al límite *Ising* [53, 60, 67–70], como al modelo de *Heisenberg* [62, 64, 71]. Estas se realizan sobre redes cuadradas de  $N = L \times L$  sitios usando el algoritmo de Metrópolis o de baño térmico. Las simulaciones de Monte Carlo han sido usadas intensamente para estudiar propiedades a temperatura finita en modelos de espines. Sin embargo, las simulaciones de sistemas con interacciones dipolares poseen ciertas sutilezas que deben ser tenidas en cuenta. Ahondaremos más en este tema en el Cap. 4

El primer diagrama de fases a temperatura finita en el espacio  $(\delta, T)$  fue calculado usando simulaciones de Monte Carlo para un sistema pequeño ( $L = 16$ ) [60]. Mejoras al mismo fueron obtenidas por Gleiser *et al.* [67, 72], el cual exponemos en la Fig. 2.10. Las simulaciones muestran que tanto la fase antiferromagnética como las fases de fajas son estables por debajo de cierta temperatura crítica  $T_c(\delta)$ , por encima de la cual el sistema se desordena. Estas fases están separadas

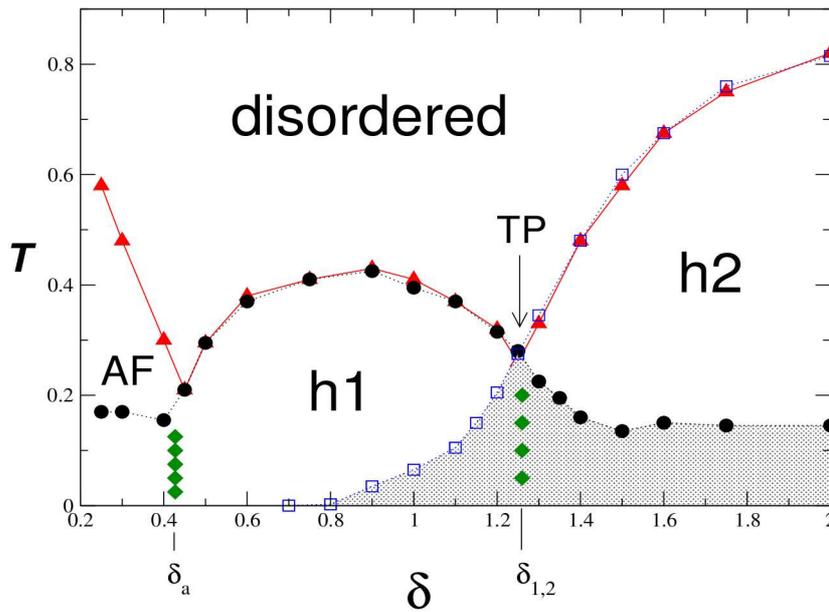


Figura 2.10: Diagrama de fases del modelo de Ising para valores de  $\delta$  pequeños extraído de la Ref. [72]. A bajas temperaturas se observan las fases antiferromagnética (AF), fajas de ancho  $h = 1$  (h1) y fajas de ancho  $h = 2$  (h2). Con triángulos está marcada la línea de transición orden-desorden. Con rombos, las líneas de transición AF-h1 y h1-h2. La curva con puntos circulares representa la región donde la fase h1 es metaestable y la curva de puntos cuadrados, la región en donde h2 es metaestable. La zona sombreada con  $\delta < \delta_{1,2}$  es la región en donde la fase h2 es metaestable. En la misma zona, para  $\delta > \delta_{1,2}$ , la fase h1 es metaestable. Las transiciones entre fases ordenadas son de primer orden.

por líneas de primer orden. En torno a la transición h1-h2 se observa coexistencia de ambas fases. Un hecho a remarcar es que las transiciones entre fajas de distinto ancho no dependen de la temperatura.

Por encima de la temperatura de desorden, el sistema presenta un estado desordenado distinto a un estado paramagnético. Éste consiste de dominios ferromagnéticos caracterizados por esquinas de 90 grados [53]. Esta es la fase tetragonal que fuera descrita por Abanov *et al.* [52] y se puede apreciar mediante cálculos numéricos del factor estructura [73]. Esta fase ha sido observada en experimentos recientes [42, 46]. En la Sec. 2.1 presentamos la imagen de una lámina de Fe/Cu en donde se observa esta fase.

La forma en que este sistema se desordena presenta una gran complejidad y algunos resultados son aún controversiales. Booth *et al.* proponen que la transición entre las fases de fajas y tetragonal corresponden a una transición orden-desorden [53]. Por otra parte, Cannas *et al.* encuentran evidencia numérica del segundo escenario descrito por Abanov *et al.*, según el cual el sistema experimenta una transición de primer orden entre la fase esméctica y tetragonal para  $\delta = 2$ . Esta transición es de primer orden débil, inducida por fluctuaciones.

### 2.2.4. Anisotropías intermedias

Un diagrama de fases para el modelo de *Heisenberg* es presentado por MacIsaac *et al.* en el espacio  $(T, \eta)$  para  $\delta = 3$  [62]. En el se distinguen una fase de fajas de ancho  $h = 4$  a bajas temperaturas y alta anisotropía, una fase ferromagnética planar a bajas temperaturas y anisotropía y una fase paramagnética de alta temperatura. La transición de reorientación presenta pendiente negativa, i.e., al aumentar la temperatura la reorientación se da desde la fase planar a la perpendicular. Este resultado presenta claras discrepancias con la evidencia experimental mencionada anteriormente [5, 39, 43, 45] y con resultados provenientes de la teoría de grupo de renormalización [74, 75]. Posteriormente estos autores aceptarán haber cometido un error en sus simulaciones [64].

En lo referente al orden de las transiciones, los resultados que se hayan en la literatura son discrepantes. En el límite de altas anisotropías la transición entre las fases de fajas y tetragonal presentado por Booth *et al.* es continua, en contradicción con los resultados mencionados para el modelo de *Ising*. Para anisotropías intermedias, la misma transición cambia gradualmente de comportamiento convirtiéndose en una transición continua o de primer orden débil. Este hecho es observado para láminas delgadas tratados con dinámica de Langevin [76, 77]. Por su parte, la transición de reorientación presenta clara evidencia de ser de primer orden [56, 74]

## Parte II

# Diagrama de fases del modelo de *Ising* dipolar



---

Las principales dificultades que presenta el modelo de *Ising* dipolar se deben al carácter de larga distancia de la interacción dipolar y a la frustración producida por la competencia de los dos términos del *Hamiltoniano*. Es por esta razón que una aproximación de campo medio, a pesar de su simplicidad, deviene en un número infinito de ecuaciones acopladas que sólo puede ser resuelto para algunas situaciones particulares. Como vimos en el Cap. 2, Czech y Villain derivan una expresión exacta para la temperatura crítica entre la fase desordenada y la fase de fajas en la aproximación de campo medio [48]. Sin embargo, para temperaturas inferiores, es necesario instrumentar métodos numéricos de solución de ecuaciones o un nuevo *ansatz* debe ser introducido a la aproximación de campo medio [47]. Si bien campo medio es una herramienta poderosa, desprecia las fluctuaciones, por lo que es importante comparar los resultados que se obtienen con los provenientes de simulaciones de Monte Carlo. En el Cap. 3 hacemos un análisis de campo medio del problema planteado, calculamos la temperatura de transición con la fase desordenada,  $T_c$ , estudiamos las diferentes soluciones con sus respectivas regiones de estabilidad, analizamos la proliferación de estados metaestables cerca de  $T_c$  y los órdenes de las transiciones. En el Cap. 4 retomamos el problema desde el punto de vista de las simulaciones de Monte Carlo mediante un algoritmo de Metrópolis.



# Capítulo 3

## Campo Medio

### 3.1. Espacio de Fourier

En esta sección extendemos el análisis de campo medio llevado a cabo en la Ref. [1] a fin de estudiar las soluciones de fajas a bajas temperaturas. Para llevar a cabo los cálculos de campo medio reescribimos la Ec. (2.6) de la forma:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (3.1)$$

con:

$$J_{ij} = \begin{cases} \delta - 1 & \text{si } i \text{ nn } j \\ 0 & \text{si } i = j \\ -\frac{1}{r_{ij}^3} & \text{otro caso} \end{cases} \quad (3.2)$$

La energía por partícula en la aproximación de campo medio tiene la forma [78]:

$$f_{mf} = \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle_\rho + \frac{1}{\beta N} \langle \ln \rho \rangle_\rho \quad (3.3)$$

donde  $N = L \times L$  es el tamaño del sistema, la constante de Boltzmann  $k_B = 1$  y los promedios son tomados usando una distribución de probabilidad de espines independientes:

$$\rho[\{S_i\}] = \prod_i \rho_i(S_i). \quad (3.4)$$

$\rho_i(S_i)$  es una densidad de probabilidad correspondiente al espín del sitio  $i$  y está sujeta a las restricciones:

$$\begin{aligned} \sum_{S_i=\pm 1} \rho_i &= 1 \\ \sum_{S_i=\pm 1} S_i \rho_i &= m_i, \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde  $m_i$  son los parámetros de orden variacionales. Tomando las Ecs. (3.5) y proponiendo  $\rho_i(S) = a + bS$  obtenemos:

$$\rho_i(S) = \frac{1 + m_i S}{2}, \quad (3.6)$$

que es reemplazado en la Ec. (3.3), obteniendo:

$$f_{mf}[\{m_i\}] = -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j + \frac{1}{2\beta N} \sum_i [(1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i)]. \quad (3.7)$$

Si se impone la condición de mínimo  $\frac{\partial f_{mf}}{\partial m_i} = 0$  sobre la Ec. (3.7) se obtiene:

$$\begin{aligned} & -\sum_j J_{ij} m_j + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1 + m_i}{1 - m_i} = 0 \\ \Rightarrow m_i &= \tanh \left( \beta \sum_j J_{ij} m_j \right), \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Este es un conjunto de  $N$  ecuaciones no lineales acopladas. Es posible agrupar los términos cuadráticos de la Ec. (3.7) expandiendo los logaritmos:

$$\frac{1}{2} \sum_i [(1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i)] = \sum_i \left[ \frac{m_i^2}{2} + \sum_{j=2}^{\infty} \left( \frac{1}{2j-1} - \frac{1}{2j} \right) m_i^{2j} \right], \quad (3.9)$$

$$f_{mf}[\{m_i\}] = \frac{1}{2N} \underbrace{\sum_{i,j} (T\delta_{ij} - J_{ij}) m_i m_j}_A + \frac{1}{\beta N} \sum_i \sum_{j=2}^{\infty} \left( \frac{1}{2j-1} - \frac{1}{2j} \right) m_i^{2j}. \quad (3.10)$$

Como mencionamos en el Cap. 2, el estado fundamental de este sistema corresponde a fajas para valores de  $\delta$  mayores a  $\delta = 0,425$  y a orden antiferromagnético para valores menores. Estos estados son fáciles de representar en el espacio de *Fourier* por lo que, asumiendo condiciones periódicas de contorno, introducimos la transformada:

$$m_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \hat{m}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}. \quad (3.11)$$

donde  $\hat{m}_{-\vec{k}} = \hat{m}_{\vec{k}}^*$  debido a que los  $m_i$  son reales. La sumatoria de los  $\vec{k}$  abarca la primera zona de *Brillouin*:

$$k_j = \frac{2\pi n_j}{L} \quad \text{con } n_j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm L/2 - 1, L/2; \quad (3.12)$$

Si aplicamos esta transformación a la expresión  $A$ , obtenemos:

$$\begin{aligned}
A &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{m}_{\vec{k}} \hat{m}_{\vec{k}'} \sum_{i,j} (T \delta_{ij} - J_{ij}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{m}_{\vec{k}} \hat{m}_{\vec{k}'} \sum_j e^{i\vec{r}_j \cdot (\vec{k} + \vec{k}')} \sum_i e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i + \vec{r}_j)} (T \delta_{ij} - J_{ij}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{m}_{\vec{k}} \hat{m}_{\vec{k}'} \sum_j e^{i\vec{r}_j \cdot (\vec{k} + \vec{k}')} (T - \hat{J}(\vec{k})) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} (T - \hat{J}(\vec{k})) \hat{m}_{\vec{k}} \hat{m}_{\vec{k}'} \frac{\delta_{\vec{k} + \vec{k}', 0}}{\sqrt{N}} \\
&= \sum_{\vec{k}} (T - \hat{J}(\vec{k})) \hat{m}_{\vec{k}} \hat{m}_{-\vec{k}} \\
&= \sum_{\vec{k}} (T - \hat{J}(\vec{k})) |\hat{m}_{\vec{k}}|^2
\end{aligned} \tag{3.13}$$

donde  $\hat{J}(\vec{k})$  está definido por la relación:

$$\hat{J}(\vec{k}) = \sum_i J_{0i} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_0)}, \tag{3.14}$$

y reemplazamos la Ec. (3.13) en (3.10) obtenemos:

$$f_{mf} = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} (T - \hat{J}(\vec{k})) |\hat{m}_{\vec{k}}|^2 + \frac{1}{\beta N} \sum_i \sum_{j=2}^{\infty} \left( \frac{1}{2j-1} - \frac{1}{2j} \right) m_i^{2j}, \tag{3.15}$$

que tiene la forma de una expansión de *Landau*. De aquí se deduce inmediatamente la existencia de un estado ordenado ( $\hat{m}_{\vec{k}} \neq 0$  para algún valor de  $\vec{k}$ ) de baja temperatura que minimiza la energía libre ya que el término de segundo orden cambia de signo al variar  $T$ . Por lo tanto la temperatura de transición orden desorden está dada por la expresión [48]

$$T_c = \max_{\vec{k}} \hat{J}(\vec{k}). \tag{3.16}$$

Transformando la Ec. (3.8), obtenemos la expresión en términos de los coeficientes de *Fourier* del mínimo de la energía:

$$m_i = \tanh \left[ \frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \hat{m}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \hat{J}(\vec{k}) \right] \quad i = 1, \dots, N. \tag{3.17}$$

A continuación, analizamos las soluciones de la Ec. (3.17) para temperaturas  $T < T_c$  y  $0 < \delta \leq 4$ . Debido a que encontrar solución a  $N$  ecuaciones no lineales acopladas es un problema muy difícil de tratar, analizaremos aquellas soluciones que comparten simetrías con los estados fundamentales, a saber: el estado antiferromagnético (AF) y las soluciones de faja. Para valores

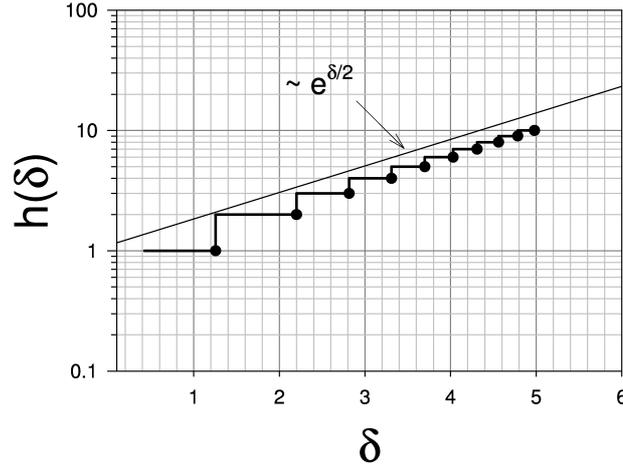


Figura 3.1: Ancho de fajas en función de  $\delta$  a  $T = 0$ . Los círculos representan los puntos donde dos curvas de energía con distinto  $h$  se intersectan.

de  $\delta$  grandes, se sabe que  $h(\delta) \sim e^{\delta/2}$  (ver Ref. [60]). Para valores pequeños,  $h$  puede ser obtenido numéricamente, comparando las energías de las diferentes configuraciones de fajas ( $T = 0, \beta \rightarrow \infty$  en la Ec. (3.15)). En la Fig. 3.1 observamos cómo el valor predicho por la teoría concuerda con los resultados numéricos, aún para el régimen de  $\delta$  pequeño [1]. La simetría de fajas está dada por la condición  $m_{(x+h,y)} = -m_{(x,y')} \forall x, y, y'$  (fajas verticales). Introduciendo este *ansatz* para hallar soluciones no triviales de la Ec. (3.17) restringimos los armónicos de  $m_i$ :

$$\begin{aligned}
 \hat{m}_{\vec{k}} e^{i[k_x(x+h)+k_y y]} &= -\hat{m}_{\vec{k}} e^{i[k_x x + k_y y']} \quad \forall x, y, y' \\
 \Rightarrow e^{ik_x h} &= -1 \quad y \quad e^{ik_y y} = e^{ik_y y'} \\
 \Rightarrow k_x &= \frac{(2n+1)\pi}{h} \quad y \quad k_y = 0 \quad \text{con } n \text{ entero}
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

De esta manera hemos simplificado el sistema: para el caso  $h = 1, k_x = \pi$ ; para  $h = 2, k_x = \pm\pi/2$ ; para  $h = 3, k_x = \pi, \pm\pi/3$ , etc... Es decir, para cada faja de ancho  $h$  tenemos  $h$  coeficientes complejos  $\hat{m}_{\vec{k}}$ . Usando la condición  $\hat{m}_{-\vec{k}} = \hat{m}_{\vec{k}}^*$ , esta restricción reduce el tamaño del problema a resolver  $h$  ecuaciones algebraicas no lineales.

Para conocer el comportamiento del sistema a temperaturas finitas, reemplazamos la Ec. (3.11) en (3.17):

$$\begin{aligned}
 &\frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{k_x \in [0, \pi]} \hat{m}_{(k_x, 0)}^{\Re} \cos(k_x x_i) - \hat{m}_{(k_x, 0)}^{\Im} \sin(k_x x_i) = \\
 &= \tanh \left\{ \frac{2\beta}{\sqrt{N}} \sum_{k_x \in [0, \pi]} \hat{J}(k_x, 0) [\hat{m}_{(k_x, 0)}^{\Re} \cos(k_x x_i) - \hat{m}_{(k_x, 0)}^{\Im} \sin(k_x x_i)] \right\} \quad i = 1, \dots, h,
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

donde  $\Re$  y  $\Im$  representan la parte real e imaginaria respectivamente y  $x_i$  es la componente  $x$  de  $\vec{r}_i$ . Para este desarrollo nos valemos del hecho de que  $\hat{J}(k_x, 0) = \hat{J}(-k_x, 0)$ . Estas ecuaciones pueden

ser resueltas numéricamente tan pronto conozcamos  $\hat{J}(\vec{k})$ . Como trabajamos con la restricción de la simetría de fajas o del estado antiferromagnético, sólo es necesario conocer  $\hat{J}(k_x, 0)$  y  $\hat{J}(\pi, \pi)$ . El cálculo de esta función se presenta en detalle en el Apéndice A, aquí sólo mostramos el resultado final:

$$\hat{J}(k_x, 0) \approx 2\delta(\cos k_x + 1) - k_x^2 + 2\pi|k_x| - \frac{2\pi^2}{3} - 2\zeta(3) \quad (3.20)$$

donde  $\zeta(x)$  es la función zeta de Riemann. Para la solución AF,  $m_{(x,y)} = m_0(-1)^{x+y}$  tenemos:

$$\hat{J}(\pi, \pi) = -4\delta + 3\zeta(3) - 4 \sum_{x=1}^{\infty} (-1)^x \sum_{y=1}^{\infty} \frac{(-1)^y}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (3.21)$$

donde las sumas pueden ser calculadas numéricamente ya que son rápidamente convergentes.

Con estas expresiones obtenemos las soluciones de fajas para  $h = 1, \dots, 6$  para un gran rango de valores de  $(\delta, T < T_c)$ . Para discriminar mínimos locales de máximos o puntos de silla, analizamos las derivadas segundas de la energía libre Ec. (3.15)

## 3.2. Análisis de estabilidad

Cada ancho de faja  $h$  está caracterizado por un vector de onda  $k_h = \pi/h$ . Si despreciamos la presencia de armónicos en la Ec. (3.19) obtenemos la solución de campo medio con la restricción de una faja de ancho  $h$ . Con ella podemos conocer la región de estabilidad de esta solución, en particular, la temperatura  $T_s(\delta, h)$  a la cual ese ancho de fajas no es más admisible. Esta temperatura se alcanza en el régimen  $\hat{m}_{\vec{k}} \ll 1$ , por lo que la Ec. (3.19) restringida a soluciones de ancho  $h$  puede ser linealizada, despreciando términos de cuarto orden, obteniendo:

$$\hat{m}_{(k_h, 0)}^{\Re} \cos(k_h x_i) - \hat{m}_{(k_h, 0)}^{\Im} \sin(k_h x_i) \sim \beta \hat{J}(k_h, 0) [\hat{m}_{(k_h, 0)}^{\Re} \cos(k_h x_i) - \hat{m}_{(k_h, 0)}^{\Im} \sin(k_h x_i)] \quad i = 1, \dots, h, \quad (3.22)$$

donde hemos usado la aproximación  $\tanh x \sim x$ . Reagrupando:

$$[\hat{m}_{(k_h, 0)}^{\Re} \cos(k_h x_i) - \hat{m}_{(k_h, 0)}^{\Im} \sin(k_h x_i)] [1 - \beta \hat{J}(k_h, 0)] \sim 0 \quad i = 1, \dots, h, \quad (3.23)$$

Esto es un sistema de  $h$  ecuaciones lineales. Exigiendo soluciones no triviales, ( $\det = 0$ ), obtenemos:

$$T_s(\delta, h) = \hat{J}\left(\frac{\pi}{h}, 0\right), \quad (3.24)$$

que es la temperatura a la cual la faja de ancho  $h$  se desordena. Las gráficas de  $T_s$  y  $T_c$  pueden ser vistas en la Fig. 3.2.

Se puede observar la acumulación de líneas de estabilidad cerca de  $T_c$  a  $\delta$  grandes, denotando la existencia de gran cantidad de estados metaestables cerca de la transición. También pueden observarse regiones por debajo de  $T_c$  que no admiten soluciones de fajas. Analizando las ecuaciones de campo medio encontramos que estas regiones presentan combinaciones de distintos anchos de fajas. De aquí en adelante los llamaremos estados de fajas híbridas y los denotaremos de la forma  $\langle h_1^{n_1}, h_2^{n_2}, \dots, h_l^{n_l} \rangle$  siguiendo la notación que Selke y Fisher usan para el modelo ANNNI [79]. Esta consiste en  $n_1$  repeticiones de un estado de faja 1,  $n_2$  repeticiones de un estado de faja 2 y así sucesivamente. Se muestran algunos ejemplos en la Fig. 3.3.

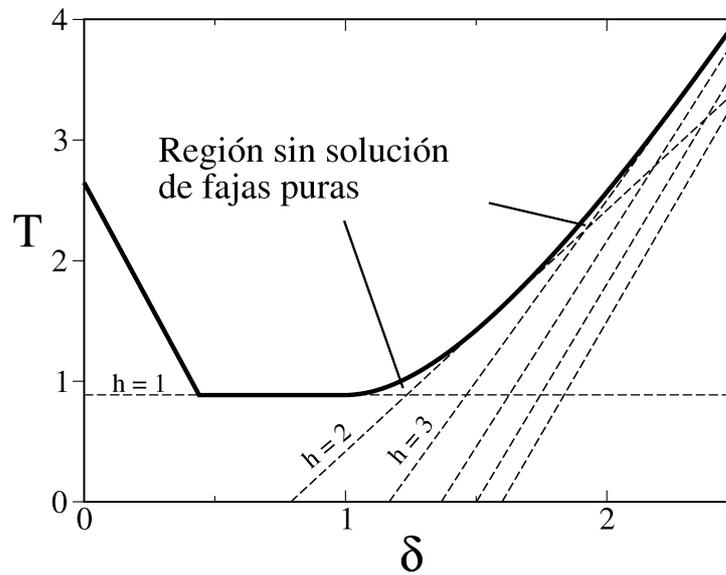


Figura 3.2: Línea llena: temperatura crítica  $T_c(\delta)$ . Línea de trazos: curva de estabilidad  $T_s(\delta, h)$  de las soluciones de faja con campo medio. Por debajo de estas líneas la solución de faja correspondiente presenta un mínimo local en la Ec. (3.19).

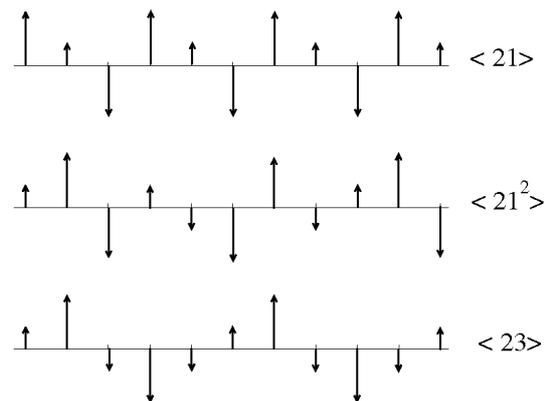


Figura 3.3: Ejemplos de arreglos de fajas híbridas con la correspondiente notación de Selke *et al.* [79].

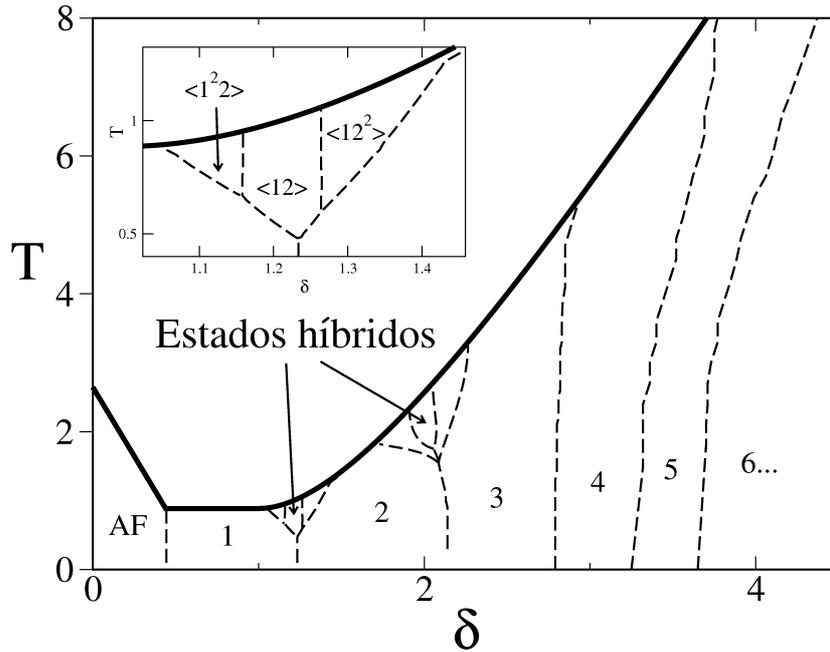


Figura 3.4: Diagrama de fases de campo medio. En líneas de trazos, transiciones entre fajas de diferente ancho. En línea llena, temperatura de orden-desorden  $T_c$ . Se observa el proceso de ramificación de fajas híbridas en las regiones de alta temperatura entre las fajas  $h = 1 - 2$  y  $h = 2 - 3$ . Inset: ampliación de la región de fases híbridas entre las fajas ancho  $h = 1$  y  $h = 2$ .

### 3.3. Diagrama de fases

Para cada punto en el espacio  $(T, \delta)$  se comparan las energías libres, Ec. (3.7), anti-transformando las soluciones obtenidas de Ec. (3.17). El diagrama de fases en el espacio es presentado en la Fig. 3.4. Allí se pueden observar las regiones de equilibrio de las soluciones de fajas puras e híbridas.

Las regiones de fajas híbridas aparecen entre fajas puras para temperaturas cercanas a  $T_c$ , las líneas de transición se ramifican a medida que aumentamos la temperatura en un proceso similar al observado en el modelo de interacciones ferromagnéticas de corto alcance e interacciones de *Coulomb* de largo alcance [66], en donde las fajas son reemplazadas por láminas debido al carácter 3d del modelo. Puede observarse como la transición entre las fajas  $h = 1$  y  $h = 2$  culmina en un punto triple con la aparición de la faja híbrida  $\langle 12 \rangle$ . Aumentando la temperatura la transición entre los estados  $h = 1$  y  $\langle 12 \rangle$  vuelve a bifurcarse en un nuevo punto triple y así sucesivamente, apareciendo una sucesión de puntos triples separando fases de complejidad creciente. En las Figs. 3.4 y 3.5 mostramos algunas de estas ramificaciones a manera de ejemplo. Las soluciones a la Ec. (3.24) son rectas tangentes a la curva  $T_c$  (ver Fig. 3.2) que dependen del menor valor de  $k$  del estado propuesto, esto incluye a las fajas híbridas. Por lo tanto, cualquier solución con simetría de fajas sólo es estable en un único punto sobre la  $T_c$ , ergo, el proceso de ramificación (“branching”) genera infinitos estados en el límite de  $T_c$ . También encontramos evidencias de la existencia de más regiones de fajas híbridas, siempre cerca de  $T_c$ , sobre la transición entre  $h = 3$  y  $h = 4$ . Esta región es mucho más pequeña que las que mostramos y el costo computacional necesario para calcular las ramificaciones es muy alto debido a la gran cantidad de armónicos que se introducen en las ecuaciones. No obstante, esperamos este tipo de soluciones en las inmediaciones de la línea

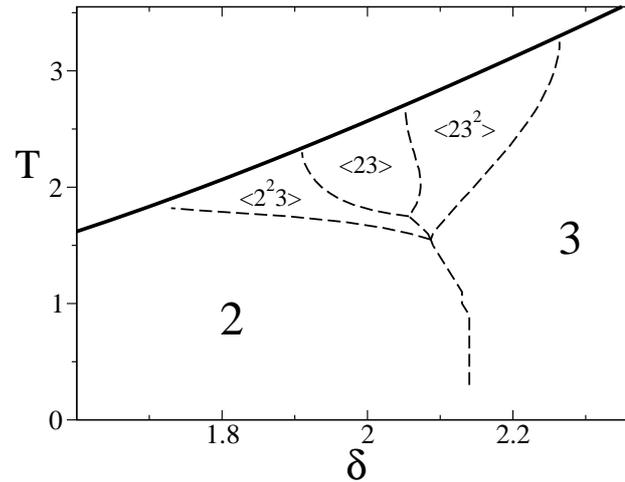


Figura 3.5: Ampliación de la región  $1,6 < \delta < 2,4$  del diagrama de fases donde se observa el proceso de ramificación de fajas híbridas en la región de fajas  $h = 2 - 3$ . La línea llena corresponde a la temperatura crítica  $T_c(\delta)$ .

de transición entre dos fajas puras a temperaturas cercanas a  $T_c$  para valores arbitrarios de  $\delta$ .

De la teoría de *Landau* de transiciones de fase sabemos que si el término de cuarto orden es positivo en la Ec. (3.10), entonces la transición es continua [80]. Por lo tanto, la aproximación de campo medio predice que la transición orden-desorden a  $T_c$  es continua. Las transiciones entre distintos anchos de faja, por su parte, son de primer orden, esto se puede ver de las curvas de energía libre que presentan un quiebre sobre la transición. Esto es acorde con la existencia de múltiples estados metaestables en el diagrama de fases.

# Capítulo 4

## Monte Carlo

La aproximación de campo medio es una herramienta poderosa de relativamente fácil aplicación para obtener información sobre un sistema. Sin embargo, su principal inconveniente es que desprecia las fluctuaciones, por lo que los resultados que arroja pueden estar sujetos a modificaciones. Por este motivo es importante comparar los resultados que describimos con los provenientes de simulaciones de Monte Carlo. En las páginas que siguen hacemos un análisis completo del sistema con simulaciones de Monte Carlo sobre redes finitas. Este modelo ha sido analizado con esta metodología en numerosos trabajos previos para valores de  $\delta$  y tamaño de red pequeños [53, 60, 67, 68, 70, 81]. Ahora nos proponemos extender los resultados anteriores a valores más grandes de  $\delta$  y, en algunos casos, a redes de mayor tamaño. Con estas mejoras se encuentran nuevas propiedades que permiten dar una interpretación a los resultados del capítulo anterior.

Las simulaciones se realizan sobre redes cuadradas de  $N = L \times L$  sitios usando el algoritmo de Metrópolis o de baño térmico. Escapa al propósito de esta tesis la descripción del método de Monte Carlo ya que este tema es tratado en numerosas publicaciones. Como referencia cito el libro de Landau y Binder [82]. Las simulaciones de Monte Carlo han sido usadas intensamente para estudiar propiedades a temperatura finita en modelos de espines. Sin embargo, las simulaciones de sistemas con interacciones dipolares poseen ciertas sutilezas que deben ser tenidas en cuenta.

En primer lugar, el hecho de que el estado fundamental corresponda a una fase modulada implica que el tamaño  $L$  del sistema debe ser conmensurable con el periodo  $2h$  de la modulación. Como vimos este valor depende de  $\delta$ . Caso contrario, se introduce una frustración artificial en el sistema.

Un segundo punto a tener en cuenta está relacionado con la estructura del estado fundamental a medida que crece  $\delta$ . Para valores relativamente grandes de  $\delta$ , las energías de estados de fajas de ancho similar al de equilibrio tienen energías muy próximas. Esto genera múltiples estados metaestables a baja temperatura [67] que ralentizan la dinámica [83] y hacen al sistema muy difícil de equilibrar.

Otras complicaciones surgen como consecuencia del carácter de larga distancia de las interacciones dipolares. Como cada espín en la red interactúa con todos los otros, alterar la orientación de uno no sólo afecta a algunos espines vecinos, sino a todos los espines de la red. Esto significa que la mayoría de los algoritmos desarrollados en los últimos tiempos para incrementar la eficacia de las simulaciones (como los algoritmos de bloque) no pueden ser aplicados, ya que utilizan como hipótesis el carácter finito del rango de las interacciones.

## 4.1. Condiciones de contorno

Una característica de las interacciones largo alcance son los fuertes efectos debido al tamaño finito de la red de espines, debido a que cada espín sufre directamente la influencia de los bordes de la red. Como en cualquier sistema, la mejor forma de disminuir los efectos de bordes es a través de la implementación de condiciones periódicas de contorno. Mientras que la interpretación e implementación de condiciones periódicas de contorno es directa en sistemas con interacciones de corto alcance, su uso en sistemas con interacciones de largo alcance requiere de más ingenio.

Una forma de solucionar este problema es suponer que tenemos una red de espines infinitamente grande, donde el sistema original de  $N$  espines ha sido replicado infinitas veces en ambas direcciones. En otras palabras, podemos pensar que el sistema infinito ha sido particionado en celdas de tamaño  $N = L \times L$  y que elegimos como solución del problema infinito las soluciones con periodicidad  $L$  en ambas direcciones. De acuerdo a esta visión, cada espín va a interactuar con los espines de la red y sus infinitas réplicas, incluyendo sus propias infinitas réplicas (esto incluye un término de auto-energía generado por la interacción de un espín con sus respectivas réplicas). La forma usual de tratar este problema es mediante una adaptación de la técnica de sumas de Ewald [73, 84], originalmente pensada para sistemas de partículas cargadas interactuantes [85, 86]. El cálculo detallado de las contribuciones de las distintas réplicas es desarrollado minuciosamente en el Apéndice B.

## 4.2. Temperatura crítica

Como mencionamos en el Cap. 2, este sistema presenta una fase tetragonal por encima de  $T_c$  que posee simetría rotacional  $\pi/4$  debido a la red subyacente y carece de orden posicional. Los dominios forman fajas mutuamente perpendiculares que colapsan de manera continua al estado paramagnético a altas temperaturas, sin mediar transición de fase. En la Fig. 4.1 mostramos las configuraciones de los estados de fajas **(a)**, nemático **(b)** y tetragonal **(c)** extraídas de las Refs. [81] y [72] que fueron calculadas mediante simulaciones de Monte Carlo sobre un modelo de *Ising* dipolar. Por debajo de  $T_c$ , el sistema puede nuclear fajas de ancho variable, con simetría de rotación  $\pi/2$  y orden posicional o una fase nemática, con la misma simetría de rotación pero sin orden posicional. Los dominios de la fase nemática son fajas con múltiples dislocaciones. La presencia de una fase nemática implica la existencia de dos transiciones de fase para temperaturas crecientes: una de fajas a fase nemática y otra de nemática a tetragonal. Ésta se detecta por la presencia de dos picos en el calor específico.

Las ecuaciones de campo medio no dan cuenta de la existencia de fases desordenadas debido a que las mismas son caracterizadas por el comportamiento de funciones de correlación del tipo  $\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$  (todos los parámetros de orden  $m_{\vec{k}}$  se anulan en las mismas). Dado que en la aproximación de campo medio  $\langle S_i S_j \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$ , dichas fases no pueden ser descriptas dentro de la teoría.

La temperatura crítica  $T_c(\delta)$ , se define como la temperatura del pico de mayor temperatura del calor específico, cuando éste presenta dos picos, y como la temperatura del único pico, cuando este presenta sólo uno (dentro de los tamaños y precisiones simulados). El calor específico está definido de la forma

$$C(T) = \frac{1}{NT^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) \quad (4.1)$$

donde  $\langle \dots \rangle$  representa el promedio térmico. Esta temperatura es la equivalente a la temperatura

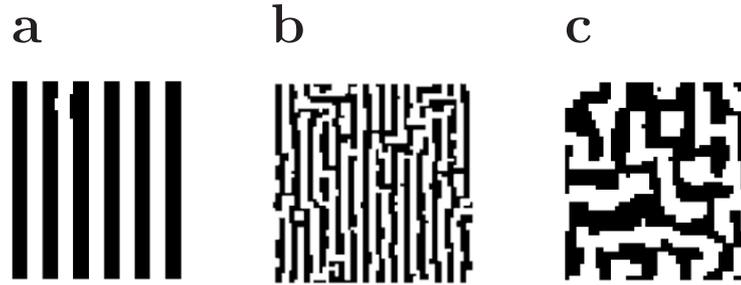


Figura 4.1: Configuraciones típicas de las fases de faja (a), nemática (b) y tetragonal (c) obtenidas mediante simulaciones de Monte Carlo sobre un modelo de *Ising* dipolar. Los píxeles blancos corresponden a un espín up y los negros a un espín down. Estos datos son extraídos de las Refs. [81] y [72].

crítica del campo medio. Para el caso en que el calor específico presenta dos picos, definimos como  $T_{nem}$  a la temperatura del pico de menor temperatura. En caso de encontrar dos picos  $T_c$  representa la transición nemática-tetragonal y  $T_{nem}$  la fajas-nemática. Con un solo pico,  $T_c$  representa la transición fajas-tetragonal sin mediar la fase nemática. También calculamos, para algunos valores de  $\delta$  el cumulante de cuarto orden de la energía, dado por:

$$V(T) = 1 - \frac{\langle H^4 \rangle}{3 \langle H^2 \rangle^2}, \quad (4.2)$$

para caracterizar el orden de la transición.

$T_c(\delta)$  fue calculado en el rango  $0 \leq \delta \leq 4,2$  siguiendo un protocolo tipo escalera: el sistema es puesto en una configuración desordenada a alta temperatura y, luego de una termalización inicial de  $10^5$  MCS,  $T$  es variada de a saltos discretos. La configuración inicial del sistema a cada temperatura corresponde a la configuración final de la temperatura anterior. Luego de descartar los primeros  $2 \times 10^4$  MCS para termalización, se procede a promediar las magnitudes deseadas, para el caso del calor específico:  $H$  y  $H^2$ , durante  $10^5$  MCS. Los valores de  $C(T)$  y  $V(T)$  así obtenidos son promediados sobre 40 corridas independientes en sistemas con tamaños que rondan  $L \sim 50$  para cada valor de  $\delta$ . De acuerdo al valor de  $\delta$  simulado, se adaptó el valor de  $L$  para evitar frustraciones del sistema debido a que la faja de equilibrio no es conmensurable con el tamaño de la red. Para ello usamos el conocimiento que ya tenemos sobre los estados de mínima energía del sistema. Los resultados corresponden a los puntos triangulares unidos por una curva continua en la Fig. 4.2.

### 4.3. Análisis de estabilidad

De acuerdo a las predicciones de campo medio de la Sec. 3 y a los trabajo previos llevados a cabo con el método de Monte Carlo [67, 72], las fajas pueden permanecer en estados metaestables para valores de  $\delta$  correspondientes al estado fundamental de fajas de distinto ancho. El parámetro

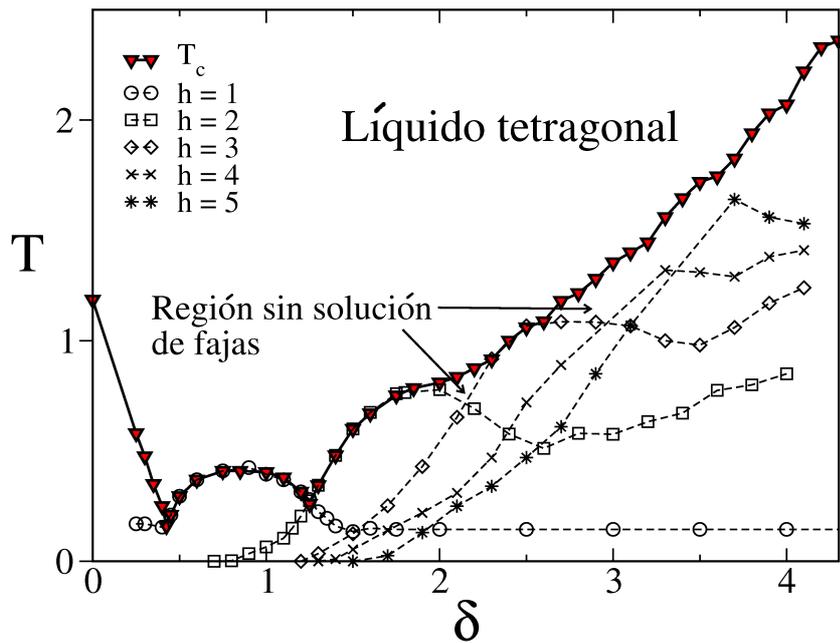


Figura 4.2: Transición de orden-desorden,  $T_c(\delta)$ , y líneas de estabilidad de las fajas,  $T_s(\delta)$ , para  $h = 1 \dots 5$ .

de orden adecuado para caracterizar estos estados es la magnetización de fajas:

$$m_h = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{x,y} (-1)^{f_h(x)} S_{x,y} \right| \right\rangle \quad (4.3)$$

con  $x, y = 1, \dots, N$ .  $f_h$  es de la forma [73]

$$f_h(x) = (i - \text{mod}(x, h))/h, \quad (4.4)$$

donde  $\text{mod}(x, h)$  es el resto de la división entera  $x/h$ . La idea es la misma que la de la magnetización staggered, este parámetro de orden es 1 en una faja ordenada verticalmente y 0 en un estado desordenado. A fin de verificar la región de estabilidad de estos estados realizamos simulaciones aplicando un protocolo tipo escalera. Este consiste en lo siguiente: partimos de un estado de fajas verticales de ancho  $h$  a  $T = 0$  e incrementamos la temperatura. El promedio térmico se realiza sobre  $10^6$  MCS para evitar efectos de metaestabilidad y  $m_h(T)$  se promedia sobre 40 corridas independientes. Algunas curvas típicas, en el rango  $0 \leq \delta \leq 4,1$  para  $h = 1 \dots 5$ , se exponen en la Fig. 4.3. De la posición del punto de inflexión obtenemos la temperatura de estabilidad  $T_s(\delta)$ , por encima de la cual la solución de faja de ancho  $h$  no es más estable. Las curvas  $T_s(\delta)$  corresponden a los puntos unidos por líneas de trazos de Fig. 4.2.

Al igual que en los resultados de campo medio (ver Cap. 3), observamos la existencia de regiones por debajo de la temperatura de transición orden-desorden que no admiten fajas puras, al menos dentro del rango  $\delta < 3$ . Para  $\delta > 3$  los resultados son demasiado ruidosos (posiblemente debidos a efectos de tamaño finito) y no podemos decir nada al respecto. Siguiendo los resultados del campo medio, buscamos la presencia de fajas híbridas utilizando como parámetro de orden una generalización de la Ec. (4.3), fracasando con todo éxito. Posteriormente, dejamos evolucionar

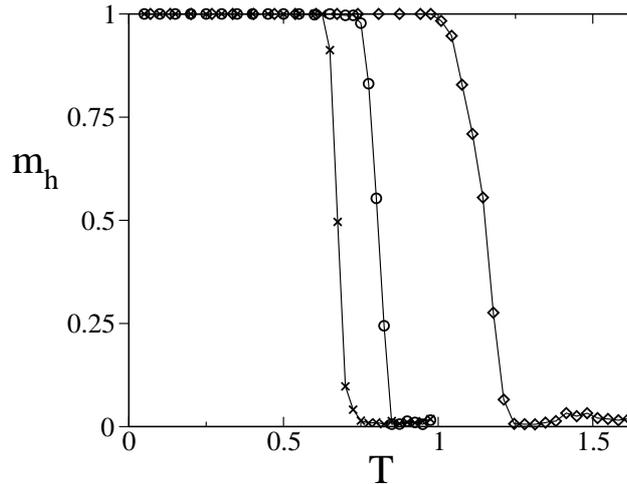


Figura 4.3: Magnetización de fajas para diferentes valores de  $\delta$  y  $h$ :  $h = 2$ ,  $\delta = 3,4$  y  $L = 60$  ( $\times$ );  $h = 3$ ,  $\delta = 4,1$  y  $L = 48$  ( $\diamond$ );  $h = 5$ ,  $\delta = 2,9$  y  $L = 40$  ( $\circ$ ).

al sistema en varios puntos de estas regiones partiendo de diferentes configuraciones iniciales de faja híbrida y analizamos la evolución de la magnitud  $|\hat{S}_{\vec{k}}|^2$  donde:

$$\hat{S}_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_i S_i e^{-i\vec{k}\vec{r}_i}. \quad (4.5)$$

En la Fig. 4.4 mostramos una curva típica para  $T = 0,81$  y  $\delta = 2$  a distintos tiempos de simulación, donde el tiempo es medido en pasos de Monte Carlo (MCS). La configuración inicial (círculos vacíos) corresponde al estado  $\langle 233 \rangle$  que decae rápidamente: el pico principal se desplaza y los armónicos característicos desaparecen. La nueva fase alcanzada es estable, manteniéndose inalterada durante los siguientes  $5 \times 10^4$  MCS que dura la simulación. Este tipo de simulaciones es repetido para diversos valores de  $(\delta, T)$  dentro de las regiones sin solución de faja. En ningún caso es posible estabilizar una fase híbrida, en clara contradicción con los resultados de campo medio.

Al igual que antes, procedemos a indagar que tipo de soluciones ordenadas existen dentro de estas regiones. Una posibilidad es la existencia de fase nemática en estas regiones. Como mencionamos en el Cap. 2, la fase nemática presenta decaimiento algebraico de la correlación espacial. Esto se puede estudiar a través del factor de estructura, que es la transformada de *Fourier* de la función de correlación:

$$\mathcal{S}(\vec{k}) \equiv \left\langle \left| \hat{S}_{\vec{k}} \right|^2 \right\rangle, \quad (4.6)$$

Cannas *et al.* muestran que la fase nemática puede ser caracterizada en forma aproximada por [81]:

$$\mathcal{S}(\vec{k}) \approx \frac{\delta_{k_y,0}}{2\sqrt{N}} \left( \frac{\lambda}{(k_x - k_0)^2 + \lambda^2} + \frac{\lambda}{(k_x + k_0)^2 + \lambda^2} \right). \quad (4.7)$$

Para analizar la posibilidad de existencia de fase nemática, corremos simulaciones en redes de tamaño  $L = 72$  para diferentes valores de  $\delta$ . El protocolo de simulación es el mismo que utilizamos para el cálculo de las líneas de estabilidad. Una vez alcanzado el punto  $(\delta, T)$  dentro de la región

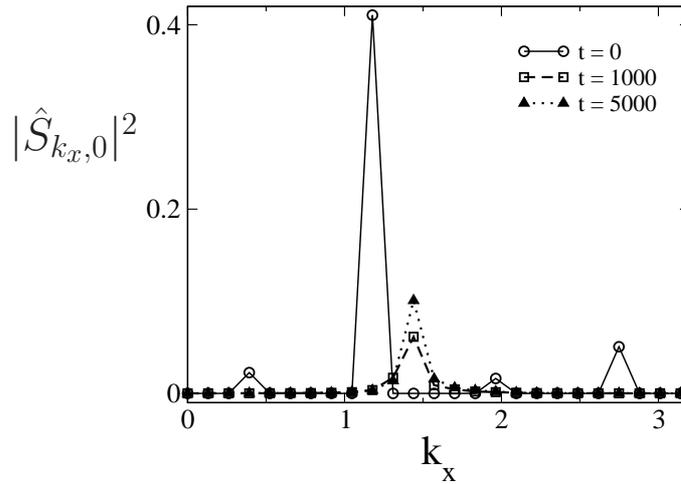


Figura 4.4: Evolución de la magnitud  $|\hat{S}_{k_x,0}|^2$  de los espines en función de la longitud de onda  $k_x$ . Círculos vacíos: configuración inicial correspondiente a una faja híbrida  $\langle 233 \rangle$ . Cuadrados vacíos: estado del sistema luego del tiempo  $t = 1000$ . Triángulos llenos, configuración final del sistema.

a estudiar, calculamos  $\mathcal{S}(\vec{k})$  promediando sobre  $2 \times 10^5$  MCS. Curvas típicas son exhibidas en Fig. 4.5 junto con un ajuste Lorentziano, de acuerdo a la forma funcional de Ec. (4.7).

En la Fig. 4.6 mostramos dos configuraciones del sistema en la fase nemática. Cada píxel del gráfico corresponde a un espín, el color blanco se asigna a  $S_i = 1$  y el negro a  $S_i = -1$ . Se puede cotejar la similitud con los resultados correspondientes a fase nemática de la Ref. [81].

## 4.4. Líneas de transición

En esta sección, calculamos las líneas de transición de fase entre fajas adyacentes comparando las respectivas energías libres. Hay que tener la precaución de elegir redes conmensurables con ambos anchos de fajas, por ejemplo: para la transición  $h \leftrightarrow h + 1$  utilizamos un sistema en donde  $L$  es múltiplo de  $2h(h + 1)$ . Para obtener la energía libre, primero calculamos la energía interna por espín ( $u(T, \delta_h) \equiv \langle H \rangle / N$ ) con el mismo protocolo utilizado en la Sec. 4.3. Tomando  $\delta = \delta_h$ , partimos de un estado de baja temperatura  $T_0$  hasta alcanzar la temperatura de trabajo  $T_w$  ( $T_w < T_s(\delta_h)$ ) variando  $T$  lentamente, siguiendo un camino cuasi-estático.  $\delta_h$  debe ser elegido por debajo del valor correspondiente a la transición  $h \leftrightarrow h + 1$  a temperatura cero. Integrando numéricamente la relación termodinámica

$$\beta f_h(\beta, \delta_h) = \beta_0 f_h(\beta_0, \delta_h) + \int_{\beta_0}^{\beta} u(\beta', \delta_h) d\beta', \quad (4.8)$$

donde  $\beta_0 = 1/T_0$  obtenemos la energía libre en el punto  $(T_w, \delta_h)$ . Luego tomamos ese estado como estado inicial de una segunda simulación que se realiza a temperatura constante variando  $\delta$  suavemente a lo largo de un camino cuasi-estático hasta alcanzar el valor  $\delta_{h+1}$ . Éste debe corresponder

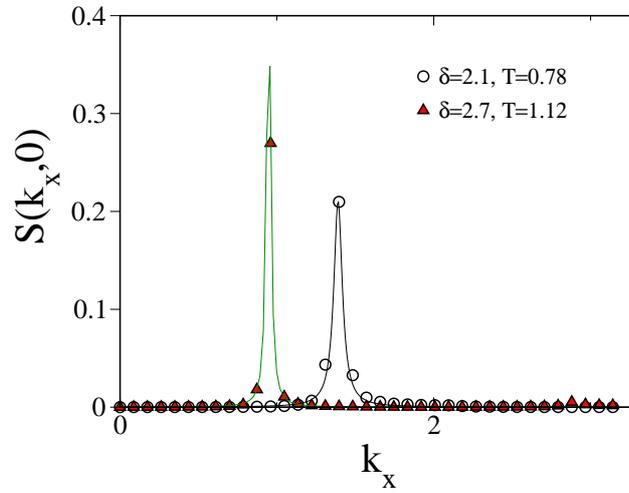


Figura 4.5: Factor estructural de la fase nemática para un sistema de tamaño  $L = 72$  con  $\delta = 2,1$ ,  $T = 0,78$ , ( $\circ$ ) y  $\delta = 2,7$ ,  $T = 1,12$  ( $\diamond$ ). La línea llena corresponde a los ajustes usando la Ec. (4.7): para  $\delta = 2,1$ ,  $T = 0,78$ , obtenemos  $\lambda = 0,033$ ,  $k_0 = 1,39$ , para  $\delta = 2,7$ ,  $T = 1,12$ ,  $\lambda = 0,0149$ ,  $k_0 = 0,947$ .  $S(0, k_y) = 0 \forall k_y$  en ambos casos.

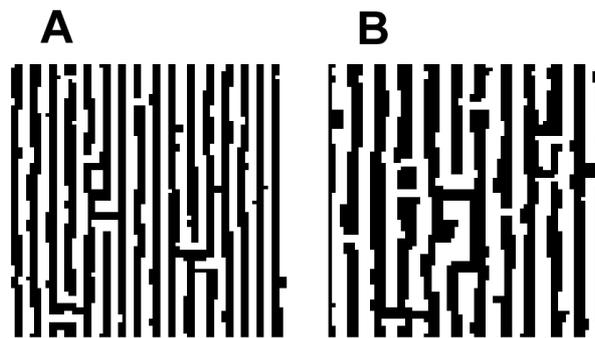


Figura 4.6: Configuración típica de espines en la fase nemática para un sistema de tamaño  $L = 72$ . (A)  $\delta = 2,10$ ,  $T = 0,78$ ; (B)  $\delta = 2,70$ ,  $T = 1,12$ .

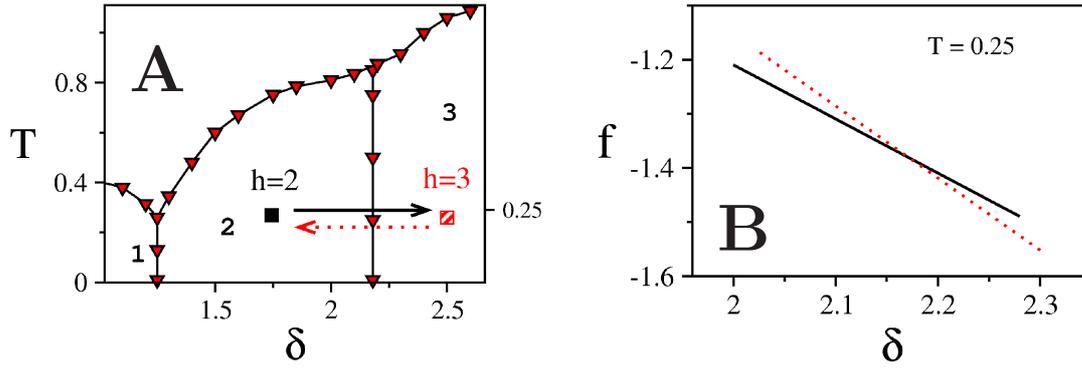


Figura 4.7: Esquema del procedimiento usado para calcular las líneas de transición entre fajas. (A) Forma típica de los caminos seguidos, (B) energías correspondientes a las trayectorias indicadas en (A) tomadas a  $T_w = 0,25$ . Ver texto para más detalles

a un estado de faja  $h + 1$ . A lo largo de este camino medimos la energía de intercambio:

$$u_{ex}(\beta, \delta) \equiv -\frac{1}{N} \left\langle \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \right\rangle \quad (4.9)$$

y, de la expresión

$$f = -\frac{1}{N\beta} \log \mathcal{Z} \quad (4.10)$$

donde  $\mathcal{Z}$  es la función partición, se puede ver que

$$\frac{\partial f}{\partial \delta} = u_{ex}(\beta, \delta). \quad (4.11)$$

Por lo tanto, la energía libre a lo largo de este último camino puede ser obtenida numéricamente integrando la ecuación

$$f_h(\beta, \delta) = \int_{\delta_h}^{\delta} u_{ex}(\beta, \delta') d\delta' + f_h(\beta, \delta_h) \quad (4.12)$$

El mismo procedimiento es repetido partiendo de  $\delta = \delta_{h+1}$  desde el estado de equilibrio de faja  $h + 1$  a  $T_0$  hasta  $T_w$  y realizando el segundo camino en sentido  $\delta_{h+1} \rightarrow \delta_h$ , obteniendo la energía  $f_{h+1}(\beta, \delta)$ . En la Fig. 4.7 se exhibe un esquema del procedimiento seguido (A) junto con las curvas de energía obtenidas (B) para  $T_w = 0,25$ ,  $\delta_h = 1,75$  y  $\delta_{h+1} = 2,5$ . El punto de la transición,  $\delta_t(T)$  se obtiene de la relación  $f_h(\beta, \delta_t) = f_{h+1}(\beta, \delta_t)$ . Siguiendo este protocolo, calculamos las líneas de transición hasta  $h = 6$ . Los resultados son expuestos en el diagrama de fases de la Fig. 4.10. Las líneas de transición  $AF \leftrightarrow h = 1$  y  $h = 1 \leftrightarrow h = 2$  ya han sido calculadas [67] y son insertadas en este trabajo para mejor comprensión.

Es evidente que todas las líneas de transición en el diagrama de fases son independientes de la temperatura, en contraposición a las predicciones de campo medio. Este fenómeno puede ser apreciado comparando la energía libre del sistema cerca de la transición  $h \leftrightarrow h + 1$  con la energía libre de la faja metaestable más próxima en función de  $T$ . Entendemos por energía libre de una

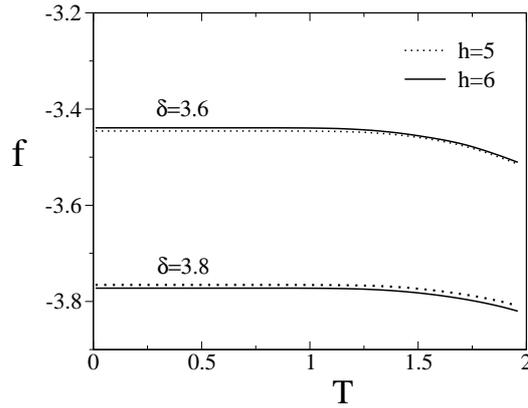


Figura 4.8: Energía libre obtenida partiendo diferentes configuraciones iniciales  $h = 5$  y  $h = 6$  para valores de  $\delta = 3,6; 3,8$  respectivamente. Notar que al no producirse un punto de cruce la línea de transición no depende de la temperatura.

faja metaestable a la obtenida de integrar numéricamente la Ec. (4.8) partiendo de un estado de fajas que no corresponde al estado de equilibrio, mediante un protocolo suficientemente lento para realizar un buen promedio de la energía interna  $u(\beta, \delta)$  pero lo suficientemente rápido para no permitir al sistema saltar la barrera de energía hacia otra configuración estable. En la práctica, para los tamaños y tiempos simulados, esto no ocurre nunca. Presentamos como ejemplo en la Fig. 4.8, las curvas de energía libre para  $\delta = 3,6; 3,8$ , a ambos lados la transición  $h = 5 \leftrightarrow h = 6$  (situada en  $\delta = 3,65$ ). Como se puede apreciar, no presentan cruces, indicando la independencia de las líneas de transición con la temperatura.

## 4.5. Temperatura de transición fajas-nemática

Ahora, calculamos la temperatura de transición fajas $\leftrightarrow$ nemática  $T_{nem}$  mediante el pico de baja temperatura del calor específico (ver Ec. (4.1)) y comparamos  $T_{nem}$  con las líneas de transición  $T_s(\delta)$ . Analizar la relación entre estas dos funciones es de gran importancia para entender el diagrama de fases. Para caracterizar el orden de la transición usamos el cumulante de cuarto orden:

$$V(T) = 1 - \frac{\langle H^4 \rangle}{3 \langle H^2 \rangle^2} \quad (4.13)$$

El protocolo de simulación difiere del utilizado en la obtención de  $T_c$  ya que las barreras de energía libre asociadas a la transición para los tamaños considerados son mucho mayores en torno a  $T_{nem}$  [81]. Una estimación realizada en el citado trabajo muestra que, para calcular  $T_{nem}$  a  $\delta = 2$ , es necesario promediar sobre  $2 \times 10^8$  MCS a cada temperatura como mínimo. Sin embargo, podemos determinar  $T_{nem}$  promediando sobre  $5 \times 10^7$  MCS dentro de la precisión con la que estamos trabajando. Esto introduce errores considerablemente grandes en la altura de los picos, por lo que no podemos realizar extrapolaciones de tamaño finito. Es posible minimizar el esfuerzo computacional apelando a los parámetros de termalización y promediación utilizados en los cálculos de  $T_c$  a fin de localizar la zona donde se encuentra  $T_{nem}$ . Partimos de un estado desordenado de alta temperatura y descendemos calculando la energía interna  $u(T)$  a lo largo de la trayectoria. El

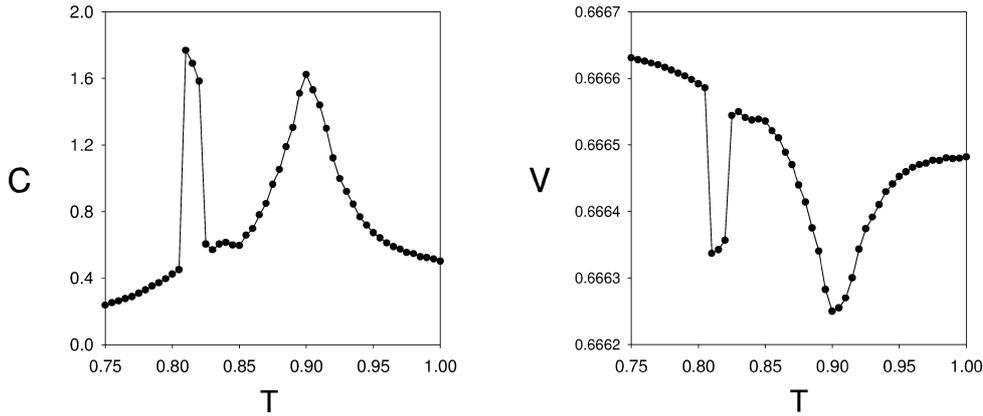


Figura 4.9: Calor específico y cumulante de cuarto orden en función de  $T$  para  $\delta = 2,25$  y  $L = 48$ .

proceso se repite aumentando la temperatura a partir de  $T = 0$  desde el estado fundamental. La localización aproximada de  $T_{nem}$  se estima observando el rango de metaestabilidad de  $u(T)$ . Luego calculamos  $C$  y  $V$  para un número limitado de temperaturas en esa región, promediando sobre  $5 \times 10^7$  MCS a cada temperatura. Repetimos este procedimiento para aumentar la precisión de  $T_c$  para los mismos valores de  $\delta$ , promediando sobre  $10^7$  MCS. Estos cálculos fueron llevados a cabo para  $\delta = 2,1; 2,25$  en la región de transición  $h = 1 \leftrightarrow h = 2$  con  $L = 48$ . La Fig. 4.9 muestra los resultados en el caso  $\delta = 2,25$ . Los valores de  $T_{nem}$  para  $\delta = 2$  (Ref. [81]),  $\delta = 2,1; 2,25$  (puntos mencionados arriba) y  $\delta = 2,7; 2,8; 2,9$  (estimados de las líneas de metaestabilidad) están expuestos en Fig. 4.10. Cálculos de  $T_{nem}$  para valores más grandes de  $\delta$  requieren redes más grandes y escapan a nuestros recursos computacionales actuales.

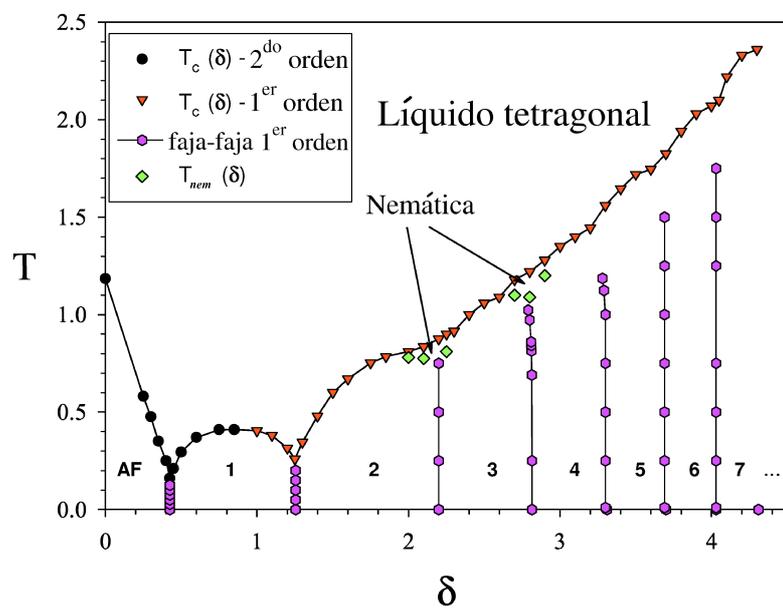


Figura 4.10: Diagrama de fases obtenido con simulaciones de Monte Carlo. Los números indican el ancho de equilibrio de las fajas. En el inset están indicados los órdenes de las transiciones, las líneas continuas son para guía del ojo.



## Parte III

# Diagrama de fases del modelo de *Heisenberg* dipolar



El modelo de *Ising* dipolar es capaz de explicar varias de las propiedades observadas en láminas ultradelgadas, como ser la existencia de un estado de fajas a baja temperatura [53, 56, 57, 73] y de una fase tetragonal de alta temperatura previa al estado paramagnético [53, 73]. La transición entre la fase de fajas y la fase tetragonal puede estar mediada por una fase nemática dependiendo del valor de la constante de intercambio [53, 81]. Estos resultados concuerdan con las predicciones de otros modelos [52, 58] y con las observaciones experimentales [42]. Este modelo también predice la existencia de un creciente número de estados metaestables a medida que aumenta el valor de la constante de intercambio [1] (ver Cap. II). No obstante, sus predicciones respecto a la variación del ancho de fajas con la temperatura son discrepantes. Vimos en el Cap. 3 como campo medio predice la variación del ancho de fajas con la temperatura. Este hecho es verificado por otros autores, tanto en una red discreta [65] como en un modelo continuo [87]. Son innumerables los resultados experimentales que indican una dependencia del ancho de faja con la temperatura [5, 42, 45, 47, 48, 52, 65, 87]. El análisis con dinámica de Monte Carlo, sin embargo, parece no dar cuenta de esta dependencia. Estudios exhaustivos realizados sobre sistemas con tamaños mucho mayores al simulado en este trabajo confirman estos resultados [88]. Una posibilidad es que este comportamiento se deba a los valores pequeños de la interacción de intercambio utilizados. Otra posibilidad es que el modelo no sea el adecuado. Uno de los defectos más importantes del *Ising* dipolar es que no modela en forma fidedigna el comportamiento de las paredes de dominio. Debido a que en campo medio se trabaja con una magnetización promedio por sitio, se obtienen paredes suaves y variación del ancho de fajas con la temperatura. Resultados recientes, sugieren que un punto importante para la comprensión del proceso que genera la variación del ancho de fajas es el papel jugado por las paredes de dominio [65]. Por estos motivos es necesario eliminar la suposición de altas anisotropías que se hiciera oportunamente sobre la Ec. (2.5).

El *Hamiltoniano* de *Heisenberg* dipolar posee diferencias cualitativas con el *Ising*. En el primero aparece la competencia entre la anisotropía uniaxial y la anisotropía que genera la interacción dipolar. La primera favorece el alineamiento perpendicular de los espines y la segunda el alineamiento en el plano. Las paredes de los dominios son suaves, anchas y de menor costo energético que las paredes *Ising*. Esto introduce una fenomenología nueva y variada que es analizada en las secciones siguientes.

Como primer paso, estudiamos el orden magnético del sistema a temperatura cero en función de los parámetros del *Hamiltoniano*, para lo cual utilizamos un método de minimización por medio de dinámica de Monte Carlo y un cálculo analítico aplicado a perfiles elegidos ad hoc. Luego nos abocamos al análisis del sistema con temperatura finita para dos valores de la constante de intercambio  $\delta$  con distinta fenomenología. Por último, valiéndonos de una hipótesis de escala, vemos que es posible extender los resultados a valores arbitrarios de  $\delta$  y a láminas de espesor variable. Con esto establecemos comparaciones con diagramas de fases obtenidos en trabajos experimentales.



# Capítulo 5

## Diagrama de fases a temperatura cero

El estudio del diagrama de fases a temperatura cero del modelo de *Heisenberg* dipolar se basa en la comparación de las energías de patrones de fajas con diferentes perfiles. Un cálculo preciso de las energías de los distintos dominios requiere tener en cuenta no sólo la componente perpendicular de la magnetización, sino también la componente planar. Tanto los experimentos sobre láminas ferromagnéticas ultradelgadas [38], como los análisis teóricos [56, 61], coinciden en el hecho de que las paredes que separan a los dominios son de *Bloch*. Sobre estas hipótesis es que calculamos el diagrama de fases a temperatura cero en el espacio  $(\delta, \eta)$ . En la primera parte, hacemos una revisión de la teoría de Yafet y Gyorgy (YG) [51] en base a nuestra notación. Sus resultados son extendidos para todo el rango de valores de  $\delta$ . Posteriormente, proponemos un nuevo perfil para describir las regiones de alta anisotropía que no son bien descritas por la teoría YG. Estos resultados son comparados con los obtenidos por medio de un método de Monte Carlo ad hoc a temperatura cero desarrollado en este trabajo. Esta parte de la tesis es realizada en colaboración con los Dres. Orlando Billoni y Daniel Stariolo.

### 5.1. Energía de los perfiles de faja

#### Mapeo a un sistema unidimensional

En primer lugar tomamos la Ec. (2.5) sobre una red cuadrada con  $N = L \times L$  sitios caracterizados con las variables  $(x, y)$ , donde  $-L/2 \leq x \leq L/2$  y  $-L/2 \leq y \leq L/2$ , en el límite termodinámico  $L \rightarrow \infty$ . Siguiendo la teoría YG, consideramos sólo las soluciones uniformes a lo largo de una línea vertical, i.e.,  $\vec{S}_{(x,y)} = \vec{M}(x) \forall y$  y suponemos que todas las paredes en el sistema son de *Bloch*, i.e.,  $M^x(x) = 0 \forall x$ . Como,

$$\left| \vec{M}(x) \right|^2 = [M^z(x)]^2 + [M^y(x)]^2 = 1, \quad (5.1)$$

por cada valor de  $x$  hay una sola componente independiente de la magnetización.

La teoría YG muestra que la energía por espín de este tipo de configuraciones se puede mapear a la energía de un modelo XY unidimensional. La diferencia de energía entre un perfil de magnetización arbitraria  $\vec{M}(x)$  y un estado ferromagnético planar es expuesto en detalle en el Apéndice C y está dado por:

$$e[\vec{M}(x)] = \delta' - \frac{\delta'}{L} \sum_x \vec{M}(x) \cdot \vec{M}(x+1) + \frac{1}{L} \sum_{x,x'} \frac{M^z(x) M^z(x')}{|x-x'|^2} - \frac{\kappa'}{L} \sum_x [M^z(x)]^2 + C [M^y(x)] \quad (5.2)$$

con

$$C[M^y(x)] = \frac{2(c_2 - c_1)}{L} \sum_x M^y(x) M^y(x+1). \quad (5.3)$$

donde  $\delta' = \delta - 2c_1$ ,  $\kappa' = \eta - 3g$ ,  $g = 1,202057\dots$ ,  $c_1 = 0,01243$  y  $c_2 = 0,07276$ . La suma  $\sum_{x,x'}$  es sobre todos los valores de  $x \neq x'$  ya que el factor  $1/2$  que permite contar los sitios dos veces ha sido incluido en la Ec. (C.9). En esta expresión hemos omitido la constante  $-2(c_2 - c_1)$ .

Aunque el término  $C[M^y(x)]$  es pequeño, introduce una corrección importante cuando las paredes de dominio son del mismo orden de magnitud que el espaciamiento de red. Esto sucede para valores pequeños de  $\delta$  ( $\delta < 5$ ), cuando las paredes y los anchos de fajas son iguales a un par de parámetros de red. Para valores grandes de  $\delta$  podemos asumir un perfil de magnetización suave, i.e.,  $M^y(x+1) \approx M^y(x)$ , obteniendo:

$$C[M^y(x)] = \frac{2(c_2 - c_1)}{L} \sum_x [1 - (M^z(x))^2]. \quad (5.4)$$

Este término puede ser absorbido en la contribución anisotrópica de la Ec. (5.2) mediante el reemplazo  $\kappa' \rightarrow \kappa = \eta - 3g + 2(c_2 - c_1)$ .

Consideremos ahora soluciones de faja de período  $2h$ , i.e., soluciones que satisfacen la condición:

$$M^z(x+h) = -M^z(x). \quad (5.5)$$

Estas soluciones se pueden expandir en coeficientes de *Fourier* de la forma:

$$M^z(x) = M_0 \sum_{m=1,3,\dots} b_m \cos\left(\frac{m\pi x}{h}\right), \quad (5.6)$$

donde se asume, sin pérdida de generalidad, que  $M^z(x)$  es una función par de  $x$ . Por otra parte, el término de anisotropía de la Ec. (5.2) puede ser escrito como

$$e_{an} = -\frac{\kappa'}{2h} \sum_{x=1}^{2h} [M^z(x)]^2 = -\frac{\kappa' M_0^2}{2} \sum_{m=1,3,\dots}^{2h-1} b_m^2, \quad (5.7)$$

donde hemos aplicado la igualdad de Parseval. El término dipolar está dado por

$$e_{dip} = \frac{M_0^2}{L} \sum_{m,m'} b_m b_{m'} \sum_{x,x'} \frac{1}{|x-x'|^2} \cos\left(\frac{m\pi x}{h}\right) \cos\left(\frac{m'\pi x'}{h}\right), \quad (5.8)$$

haciendo el cambio de variables

$$\begin{aligned} X &= (x+x')/2 \\ u &= x-x', \end{aligned}$$

obtenemos:

$$e_{dip} = M_0^2 \sum_{m=1,3,\dots} b_m^2 D_m(h) \quad (5.9)$$

donde

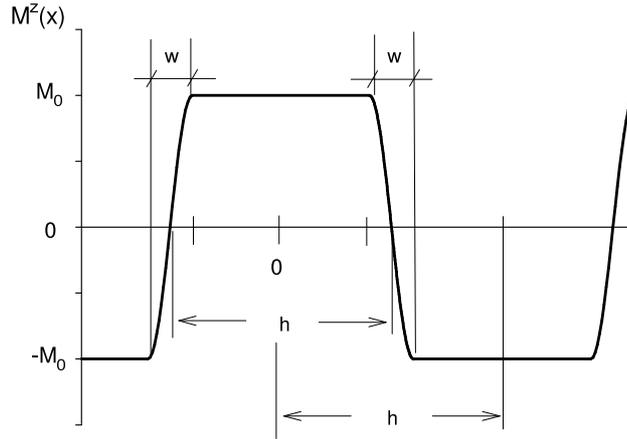


Figura 5.1: Perfil de magnetización con pared sinusoidal (PS).

$$D_m(h) \equiv \sum_{u=1}^{\infty} \frac{\cos(m\pi u/h)}{u^2} = \frac{\pi^2}{6} - \frac{\pi^2 m}{2h} + \left(\frac{\pi m}{2h}\right)^2 \quad 0 \leq m \leq 2h \quad (5.10)$$

(ver Ref.[89, 1.442, pp.84]).

La energía de intercambio conviene que sea expresada en términos del ángulo  $\phi(x)$  entre  $\vec{M}(x)$  y el eje  $z$ :

$$M^z(x) = \cos[\phi(x)]$$

$$M^y(x) = \sin[\phi(x)]$$

donde el ángulo  $\phi(x)$  tiene la misma periodicidad que  $\vec{M}(x)$  por lo que puede ser desarrollado en términos de los coeficientes  $b_m$ . La energía queda expresada como sigue:

$$e_{exc} = -\delta \frac{1}{L} \sum_x \cos(\phi(x) - \phi(x+1)) \quad (5.11)$$

Incorporando todos los términos, la energía por espín resultante es:

$$e[\vec{M}, \delta, \eta] = \delta' - \frac{\delta'}{L} \sum_x \cos(\phi(x) - \phi(x+1)) + M_0^2 \sum_{m=1,3,\dots} b_m^2 D_m(h) - \frac{\kappa' M_0^2}{2} \sum_{m=1,3,\dots} b_m^2 + C[M^y(x)] \quad (5.12)$$

Esta expresión es genérica y puede ser aplicada para cualquier perfil de fajas.

## 5.2. Diagrama de fases para valores de $\delta$ pequeños

Ahora buscamos el mínimo de la Ec. (5.12) para diferentes valores de  $\delta, \eta$ . Para ello proponemos diferentes perfiles  $M^z(x)$  y comparamos las energías respectivas. La energía de cada perfil es minimizada sobre sus respectivos parámetros variacionales. En primer lugar consideramos el perfil

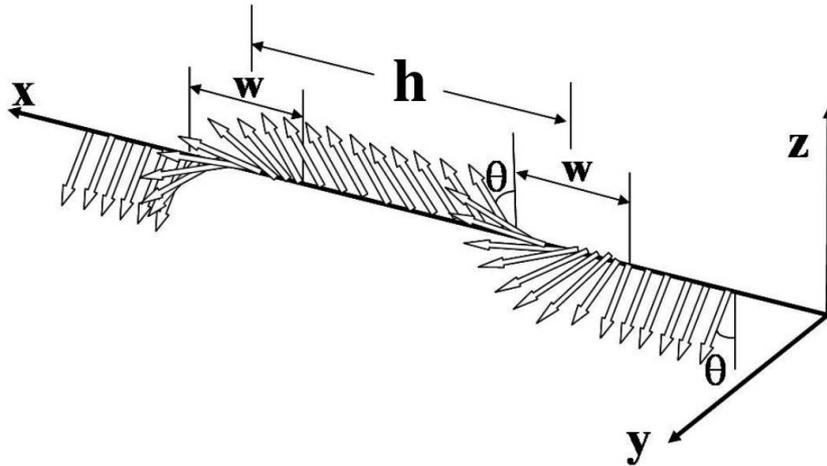


Figura 5.2: Esquema de la rotación de los espines en la pared.

de la teoría YG, que es constante dentro de los dominios y posee un comportamiento sinusoidal dentro de las paredes:

$$M^z(x) = \begin{cases} M_0 & \text{si } 0 \leq x \leq \frac{h-w}{2} \\ M_0 \cos\left(\pi \frac{x-(h-w)/2}{w}\right) & \text{si } \frac{h-w}{2} \leq x \leq \frac{h+w}{2} \\ -M_0 & \text{si } \frac{h+w}{2} \leq x \leq h \end{cases} \quad (5.13)$$

junto con la propiedad (5.5) (ver Fig. 5.1).  $M_0$  es el valor absoluto de la magnetización dentro de los dominios y  $w$  es el ancho de fajas.

El ángulo canted se define a través de la relación  $M_0 = \cos \theta$ , i.e., definimos el ángulo canted como el mínimo -sobre todos los espines- del ángulo que forma el espín con respecto al eje  $z$ . En la Fig. 5.2 mostramos un esquema de la rotación de los espines en la pared en donde se señala el ángulo canted. La teoría YG resuelve este problema para el caso en donde el cálculo en el espacio continuo es válido, i.e., cuando  $h \gg 1$  y  $w \gg 1$  y el perfil se puede considerar suave. Vimos en el Cap. 2 que el ancho de fajas crece con  $\delta$ , por lo que este límite es válido para valores de  $\delta$  grandes. Para valores pequeños, el carácter discreto de la red debe ser considerado. El problema variacional para el rango de valores de  $\delta$  pequeños puede ser resuelto en forma exacta, numéricamente, minimizando la Ec. (5.12) respecto de parámetros variacionales enteros,  $h$  y  $w$  y el parámetro  $M_0$ . En otras palabras, para cada par  $(\delta, \eta)$  calculamos la energía de la expresión (5.12) para el perfil (5.13) para diferentes combinaciones de  $h = 1, 2, \dots$  y  $w = 1, \dots, h$ . Este conjunto de valores es limitado y rápidamente computable. Para cada par de valores  $h, w$  tomamos el valor de  $M_0$  que minimiza la energía dentro de una resolución  $\Delta M_0 = 0,01$ . La energía de cada par  $h, w$  es comparada, eligiendo a la menor de todas como solución del problema variacional. Detalles de la implementación se encuentran en el Apéndice D. Este procedimiento genera tiempos de cómputo accesibles para  $\delta \leq 10$ , cuando el ancho de fajas es relativamente pequeño ( $h < 140$ ). El ancho de faja máximo que puede ser alcanzado a un dado valor de  $\delta$  se obtiene del modelo de *Ising*, ya que éste presenta la pared es más costosa. Los resultados de la minimización son comparados con los obtenidos mediante simulaciones de Monte Carlo (MC). Detalles de esta técnica se pueden encontrar en el Apéndice E. Con estos cálculos obtenemos el diagrama de fases en la región de

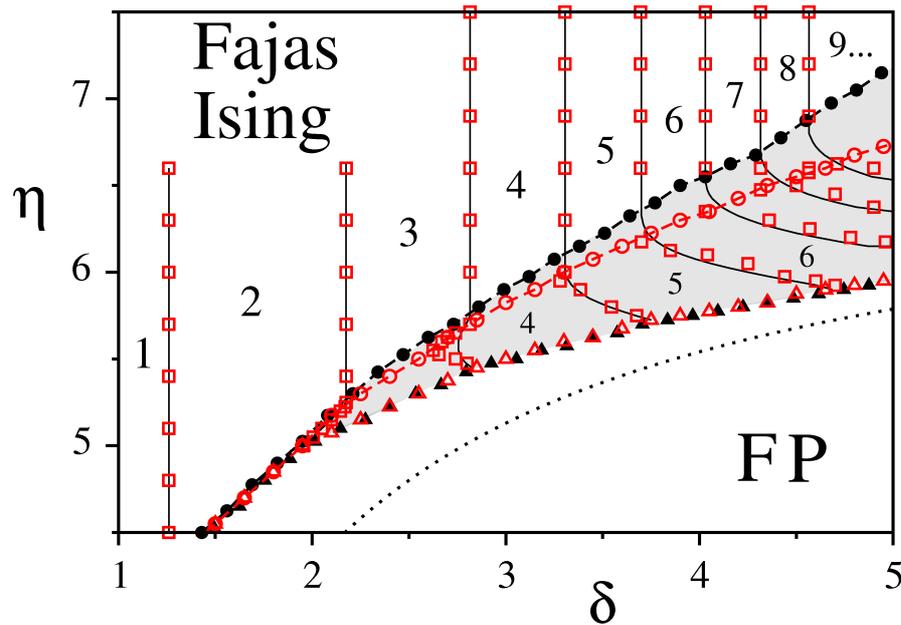


Figura 5.3: Diagrama de fases a temperatura cero para valores de  $\delta$  pequeños. Puntos rojos abiertos: solución exacta del perfil PS. Puntos negros cerrados y líneas continuas: simulaciones de MC. Cuadrados y líneas continuas: líneas de transición entre fajas de diferente ancho. La región sombreada corresponde a fase canted. Los triángulos corresponden a la línea de reorientación. MC y PS muestran un gran acuerdo cerca de la línea de reorientación, mientras que PS predice la transición canted-*Ising* a valores menores de anisotropía. La línea negra punteada corresponde a la línea de reorientación calculada mediante la aproximación de perfil PS en la aproximación del continuo.

valores de  $\delta$  pequeños que se puede apreciar en la Fig. 5.3.

En el diagrama se distinguen cuatro tipos de soluciones. Si el mínimo de energía corresponde a  $w = 1$  y  $M_0 = 1$  (dentro de la resolución  $\Delta M_0 = 0,01$ ) la llamamos estado de fajas *Ising*. En otras palabras, este perfil representa una onda cuadrada. Si  $M_0 = 1$  pero  $w > 1$  la llamamos estado saturado. Si por el contrario,  $0 < M_0 < 1$ , el estado es canted. Por último, si  $M_0 = 0$ , tenemos un estado ferromagnético en el plano (FP).

De la Fig. 5.4 vemos que, para valores relativamente grandes de  $\eta$ , el mínimo de la energía está dado por un estado *Ising*, donde el ancho de fajas es independiente de la anisotropía  $\eta$ . Para valores pequeños de  $\eta$ , la configuración de mínima energía corresponde al estado FP. La línea de reorientación puede separar tanto a los estados FP e *Ising* ( $h < 3$ ) como a los FP y canted ( $h \geq 3$ ).

Una fuerte variación del ancho de fajas se observa dentro de la región canted. Notar que las líneas de separación entre distintos anchos de fajas son verticales en la fase *Ising* y prácticamente horizontales en la fase canted. En otras palabras, el crecimiento exponencial del ancho de fajas en la fase *Ising* en función de  $\delta$  se transforma en un crecimiento exponencial en función de  $\eta$  en la fase canted.

Hay un muy buen acuerdo entre el perfil sinusoidal (PS) y los resultados obtenidos con MC excepto cerca de la transición entre las fases *Ising* y canted. En esta zona, el perfil PS se aleja del perfil de mínima energía calculado mediante MC. En la Fig. 5.4 comparamos las energías del perfil PS y el calculado con MC en función de  $\eta$  para  $\delta = 4,58$ . La energía del perfil PS ajusta muy

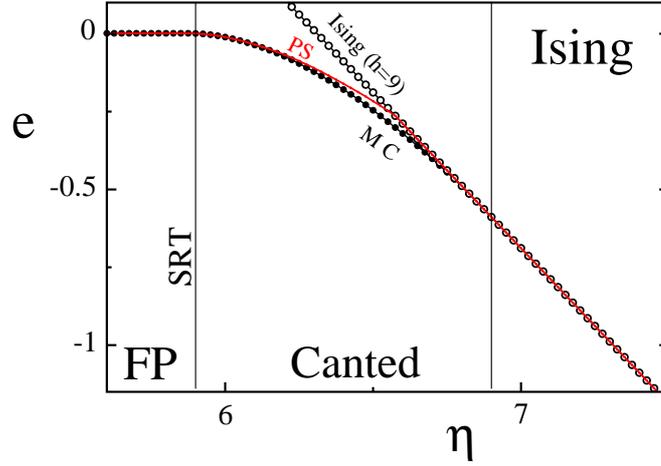


Figura 5.4: Energía por espín para  $\delta = 4,58$  en función de  $\eta$  obtenida mediante MC (línea de puntos circulares llenos) y PS (línea sólida). Los círculos abiertos corresponden a la energía de faja *Ising* para  $h = 9$  (valor de equilibrio en el límite  $\eta \rightarrow \infty$ ).

bien los resultados de las simulaciones cerca de la línea de reorientación. Sin embargo, a medida que se incrementa el valor de  $\eta$ , la aproximación empeora. Esto se refleja en el valor de  $\eta$  de la transición canted-*Ising*. El perfil PS alcanza el valor de energía del perfil *Ising* para anisotropías menores que la solución de MC, lo que determina que la línea de transición calculada con este método esté por debajo de la exacta. Por otro lado, se puede notar del diagrama de Fig. 5.3 que el rango de valores de  $\eta$  donde las paredes no son bien descritas por un perfil PS crece en función de  $\delta$ .

### 5.3. Diagrama de fases para valores de $\delta$ grandes

Para valores de  $\delta$  grandes, el problema variacional para el perfil PS puede ser resuelto en la aproximación continua introducida por YG. Esto arroja las siguientes ecuaciones (ver Apéndice F):

$$\frac{\delta k}{\Delta} (1 - \text{sen } \theta) = \frac{\pi}{2} G(\Delta) \cos^2 \theta \quad (5.14)$$

$$\frac{\delta k^2}{\Delta^2} (1 - \text{sen } \theta) = - \left[ \gamma + \pi k \frac{dG}{d\Delta} \right] \cos^2 \theta \quad (5.15)$$

$$\frac{\delta k^2}{2\Delta} \cos \theta = - \left[ 2\gamma \left( 1 - \frac{\Delta}{2} \right) - \pi k G(\Delta) \right] \text{sen } \theta \cos \theta \quad (5.16)$$

donde  $\Delta \equiv w/h$ ,  $k \equiv \pi/h$  y  $\gamma = \pi^2/3 + 3g - 2(c_2 - c_1) - \eta$ . En el límite  $\Delta \rightarrow 1$  (perfil sinusoidal puro), estas ecuaciones pueden ser resueltas analíticamente, prediciendo la línea de reorientación:

$$\eta_{SRT}(\delta) = \frac{\pi^2}{3} + 3g - (c_2 - c_1) - \frac{\pi^2}{2\delta} = 6,775.. - \frac{\pi^2}{2\delta} \quad (5.17)$$

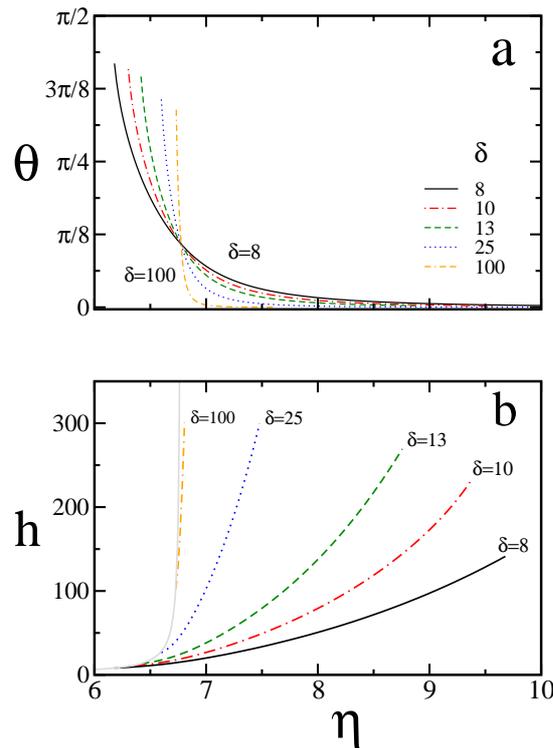


Figura 5.5: Ángulo canted (**a**) y ancho de fajas (**b**) en función de la anisotropía  $\eta$  para diferentes valores de  $\delta$  obtenido mediante la aproximación continua del PS (Ec. (5.14)-(5.16)).

(ver Apéndice F). Esta función es graficada en línea de puntos en la Fig. 5.3.

Para valores arbitrarios de  $\eta$  y  $\delta$  las Ec. (5.14)-(5.16) pueden ser resueltas numéricamente. En la Fig. 5.5 mostramos las soluciones numéricas para  $\theta$  y  $h$  en función de  $\eta$  para distintos valores de  $\delta$ . Podemos observar como el rango de valores de  $\eta$  para los cuales existe fase canted disminuye dramáticamente a medida que crece  $\delta$ . Para  $\delta \sim 100$  esta región prácticamente desaparece salvo muy cerca de la reorientación, tal como fuera predicho por Politi [56].

Una mejor comprensión del sistema se obtiene comparando el comportamiento del ángulo canted y la magnetización en el plano, definida por:

$$M_{\parallel} \equiv \frac{1}{L} \sum_{x=-L/2}^{L/2-1} M^y(x) \approx \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} M^y(x) dx, \quad (5.18)$$

donde la primera definición se usa para los cálculos en redes discretas y la segunda para los realizados en el continuo. En los perfiles obtenidos con MC, la fase canted desaparece gradualmente a medida que  $\delta$  crece apareciendo en su lugar la fase saturada. En la Fig. 5.6 vemos el comportamiento del ángulo canted y la magnetización en el plano  $M_{\parallel}$  en función de  $\eta$  para  $\delta = 7,5$ . Sobre un amplio rango de valores de  $\eta$  el ángulo canted es nulo pero la magnetización en el plano es distinta de cero. Esto significa que los espines con componente no nula en el plano se concentran en las paredes. En otras palabras, tenemos un estado saturado con paredes anchas  $w > 1$  que no puede ser descrito por los perfiles PS.

Para calcular la línea de transición entre la fase canted y los estados saturados para valores

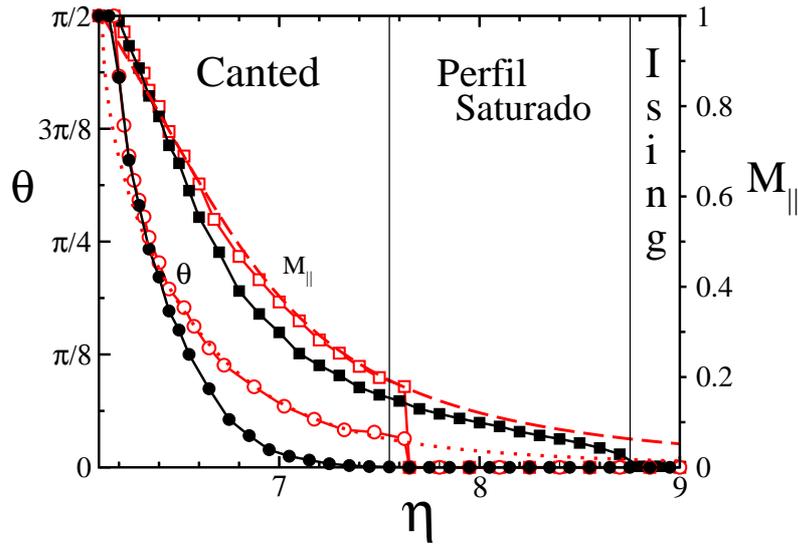


Figura 5.6: Ángulo canted (círculos) y magnetización en el plano (cuadrados) en función de la anisotropía  $\eta$  para  $\delta = 7,5$ . Los símbolos llenos corresponden al cálculo MC. Los símbolos abiertos corresponden al cálculo con perfil PS exacto. La línea continua que une estos puntos es sólo una guía para el ojo. En líneas de trazos y punteada, los resultados del cálculo del perfil PS en la aproximación continua.

de  $\delta > 8$ , es necesario introducir una aproximación analítica. Hemos visto que los perfiles PS no dan cuenta del comportamiento de las paredes para valores de  $\eta$  alejados de la línea de reorientación. Esto es consistente con los resultados del modelo micromagnético que predice una pared hiperbólica para láminas con alta anisotropía [56, 61]. Esto puede ser observado en la Fig. 5.7, donde comparamos los perfiles obtenidos mediante MC (puntos negros) y PS (línea continua). En línea de trazos graficamos el ajuste mediante una tangente hiperbólica a los datos obtenidos con MC. Evidentemente, el perfil hiperbólico es más acorde al comportamiento de la pared. Con estos resultados, proponemos un perfil hiperbólico de pared (PH). Centrando la pared en el eje de coordenadas, éste está dado por la siguiente expresión:

$$M^z(x) = M_0 \operatorname{tgh} \left( \frac{x}{l_w} \right) \quad \text{para} \quad -h/2 \leq x \leq h/2 \quad (5.19)$$

junto con la Ec. (5.5), donde  $w = fl_w$ . En el límite de valores de  $\delta$  grandes, asumiendo un perfil suave y  $h \gg w$ , la energía de anisotropía puede ser expresada de la forma (ver Apéndice H):

$$e_{an} \approx -\kappa M_0^2 \left[ 1 - \frac{2l_w}{h} \operatorname{tgh} \left( \frac{h}{2l_w} \right) \right] \quad (5.20)$$

La constante de intercambio puede ser obtenida de la misma manera (ver Apéndice H), en el límite de  $h \gg w$ :

$$e_{exc} \approx -\delta \left[ 1 - \frac{l_w}{h} \left( \frac{M_0^2 - 1}{M_0} \operatorname{tgh}^{-1} \left( M_0 \operatorname{tgh} \left( \frac{h}{2l_w} \right) \right) + \operatorname{tgh} \left( \frac{h}{2l_w} \right) \right) \right] \quad (5.21)$$

La energía dipolar puede ser calculada usando las Ecs. (5.9) y (5.10). Los coeficientes de *Fourier*

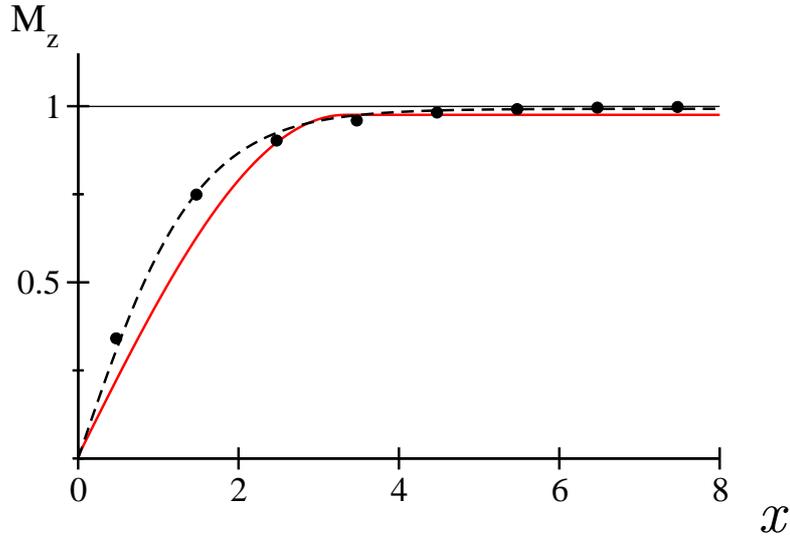


Figura 5.7: Perfil de magnetización de un estado saturado correspondiente a  $\delta = 8$  y  $\eta = 7$ . Puntos, valores correspondientes al cálculo MC. El ancho de faja que se registra es  $h = 20$ . Línea continua, valores obtenidos mediante el perfil PS en la aproximación continua ( $M_0 = 0,98$ ,  $h = 20$ ,  $w = 6,7$ ). Línea de trazos, ajuste de la función  $M_0 \operatorname{tgh}(x/l_w)$  ( $M_0 = 0,993$ ,  $l_w = 1,48$ ).

del perfil (5.19) pueden ser calculados usando la aproximación (H.8) (ver Apéndice H). La energía total resultante queda expresada en término de los parámetros variacionales  $h$ ,  $\theta$  y  $l_w$  y puede ser minimizada numéricamente. Comparando los mínimos de energía para los perfiles PS y PH obtenemos un crossover entre paredes sinusoidales y paredes hiperbólicas. Esto se muestra en la Fig. 5.8 (línea de trazos). Por encima de esta línea un perfil PH tiene menor energía que uno PS. Tal como hicimos en el cálculo MC, imponiendo la condición  $\theta = 0,01$  podemos calcular la línea de transición entre la fase canted y la saturada. Los resultados se exhiben en la Fig. 5.8 junto con la línea de reorientación (Ec. (5.17)) y se comparan con los resultados obtenidos con MC hasta  $\delta = 15$ . El acuerdo existente entre estos dos procedimientos es excelente.

Para valores de  $\eta$  grandes, el crecimiento exponencial de  $h$  hace difícil el cálculo numérico de la contribución dipolar del perfil PH. En lugar de eso, usamos un argumento heurístico para aproximar su valor. El principal error que se introduce al utilizar un perfil PS lejos de la reorientación se debe a las contribuciones de intercambio y anisotrópicas a la energía, no a la contribución dipolar. La energía dipolar está determinada principalmente por los dominios, independientemente de la forma de la pared. Con este argumento aproximamos la contribución dipolar del perfil PH reemplazándola con la contribución dipolar del PS (Ec. (F.9)). El término dipolar en el perfil PS se define a través del ancho de pared  $w$  cuyo valor corresponde a la longitud sobre la cual los espines invierten su valor. Por lo tanto, para utilizar la contribución dipolar del perfil PS es necesario elegir un parámetro de ajuste para relacionar las variables  $w$  y  $l_w$ . Tomando  $w = f l_w$ ,  $G(\Delta)$  puede ser aproximada por la expresión:

$$G(\Delta) \approx \frac{8}{\pi^2} \ln \left( \frac{6\pi}{5\Delta} \right) \quad (5.22)$$

en el límite  $\Delta \ll 1$  ( $l_w/h \ll 1$ ) (ver Apéndice G).

Por lo tanto, la expresión para la energía dipolar queda de la forma:

$$e_{dip} = M_0^2 \left[ \pi^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{f l_w}{6h} \right) - \frac{4}{h} \ln \left( \frac{6\pi h}{5f l_w} \right) \right]. \quad (5.23)$$

Comparamos la energía obtenida de la ecuación de arriba con la obtenida usando la aproximación del Apéndice H para diferentes valores de los parámetros del sistema. Verificamos que el error cometido por la Ec. (5.23) es siempre menor a un 1% para  $h/l_w \geq 20$  si tomamos  $f = 4$ . También observamos que este valor de  $f$  es el que mejor ajusta los resultados del MC. Asumiendo  $M_0 = 1$ , la energía total por espín (relativa al estado FP) para un perfil PH en el límite  $h \gg w$  puede ser aproximada por la expresión:

$$e_{PH} = \frac{\pi^2}{3} - \kappa + \frac{\delta/l_w + 2l_w(\kappa - \pi^2/3)}{h} - \frac{4}{h} \ln \left( \frac{3\pi h}{10l_w} \right). \quad (5.24)$$

Minimizando la Ec. (5.24) con respecto a los parámetros variacionales  $h$  y  $l_w$  obtenemos:

$$h = \frac{10}{3\pi} l_w \exp \left[ \frac{\delta}{2l_w} \right] \quad (5.25)$$

con

$$l_w = \frac{\delta}{2 + \sqrt{4 + 2(\kappa - \pi^2/3)\delta}} \quad (5.26)$$

en concordancia con los resultados de Politi [56].

Con los cálculos previos podemos estimar la línea de transición entre las fajas saturadas y un estado de fajas *Ising*. En el límite de valores de  $h$  grandes, la energía de las fajas *Ising*, i.e., para

$$\phi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x \leq h/2 \\ \pi & \text{si } h/2 < x \leq h \end{cases} \quad (5.27)$$

puede ser fácilmente calculada para la Ec. (5.12). Los coeficientes de *Fourier* se calculan tomando el límite  $\Delta \rightarrow 0$  en la Ec. (F.2).

$$b_m = (-1)^{(m-1)/2} \frac{4}{\pi m} \quad (5.28)$$

Usando las Ecs. (5.9) (5.10) la energía dipolar está dada por:

$$e_{dip} \sim \frac{\pi^2}{3} - \frac{8}{h} \sum_{m=1,3,\dots}^{2h-1} \frac{1}{m} + \frac{4}{h} = \frac{\pi^2}{3} + 4 \frac{\psi(h) - \beta}{h} \quad (5.29)$$

donde  $\beta \equiv \gamma_e + \ln 4 - 1$ ,  $\gamma_e \approx 0,577216$  es la constante gama de *Euler* y  $\psi(x)$  es la función digamma [89]. La energía por espín, respecto a un estado FP, está dado por

$$e_I = -\kappa' + \frac{\pi^2}{3} + \frac{2\delta' - \beta}{h} - \frac{4\psi(h)}{h} \quad (5.30)$$

Minimizando la Ec. (5.30) con respecto a  $h$  obtenemos la ecuación  $\delta'/2 - \beta = F(h)$ , donde  $F(h) = \psi(h) - h\psi'(h) \sim \ln h - 1$ . Con esta expresión recobramos el resultado conocido de la

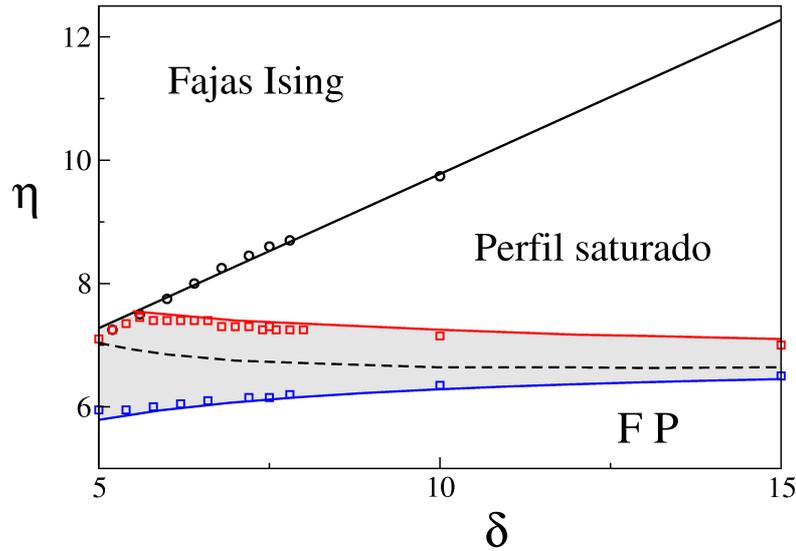


Figura 5.8: Diagrama de fases a temperatura cero para valores grandes de  $\delta$ . Los símbolos corresponden al cálculo MC y las líneas a los resultados teóricos. La línea de trazos corresponde al crossover entre el comportamiento de pared sinusoidal y el hiperbólico. La línea azul corresponde a la Ec. (5.17). La línea roja, es obtenida con el perfil PH con  $\theta = 0,01$ . La línea negra corresponde a la Ec. (5.25).

literatura:  $h \sim e^{\delta/2}$ . Comparando las energías, encontramos que el perfil PH tiene menos energía que el estado *Ising* para cualquier valor de  $\eta$ . Analizando la Ec. (5.25) vemos que la variación del ancho  $h$  de los dominios depende de la variación del ancho de pared. Por lo tanto  $h$  va a crecer en función de  $\eta$  hasta que el ancho de pared alcance el valor del parámetro de red  $l_w = 1$ . En este caso, la Ec. (5.25) alcanza el comportamiento  $h \sim e^{\delta/2}$ . Por lo tanto la línea de transición entre las fases saturada e *Ising* puede ser obtenida imponiendo la condición  $l_w = 1$  a la Ec. (5.26):

$$\eta = \frac{1}{2} \delta - 2 + \frac{\pi^2}{3} + 3g - 2(c_2 - c_1). \quad (5.31)$$

Esta función es graficada en la Fig. 5.8, observándose un completo acuerdo con los resultados de MC.

Con esta nueva evidencia, vemos que el sistema pasa a través de un estado canted a medida que aumenta la anisotropía aunque el valor de  $\delta$  sea tan grande como el encontrado en sistemas experimentales. Para láminas basadas en deposiciones de Fe tenemos que  $\delta \sim 100$  (considerando una red cúbica bicapa de Fe/Cu(100)  $J_{Fe} \sim 30 \text{ meV}$ , la constante de red  $d_{Fe} \sim 2\text{ML}$  y  $\mu_{Fe} \sim 3 \mu_B$ ). Para  $\delta \sim 100$  el intervalo de anisotropía para la fase canted es  $\Delta\eta \equiv \eta - \eta_{SRT} \approx 0,2$ . Si bien el valor es pequeño, la fase canted podría ser detectada suficientemente cerca de la reorientación en láminas con baja anisotropía, como las de Fe/Cu(100) [90] o Fe/Ni/Cu [91] depositadas a bajas temperaturas.

En la Fig. 5.9 mostramos el ancho de fajas del perfil PH en función de  $\eta$  para diferentes valores de  $\delta$ . En ella comparamos las soluciones variacionales de las Ecs. (5.20) y (5.21) usando la aproximación dada en el Apéndice H en un caso y la aproximación asintótica dada por las Ecs. (5.25) y (5.26) en el otro.

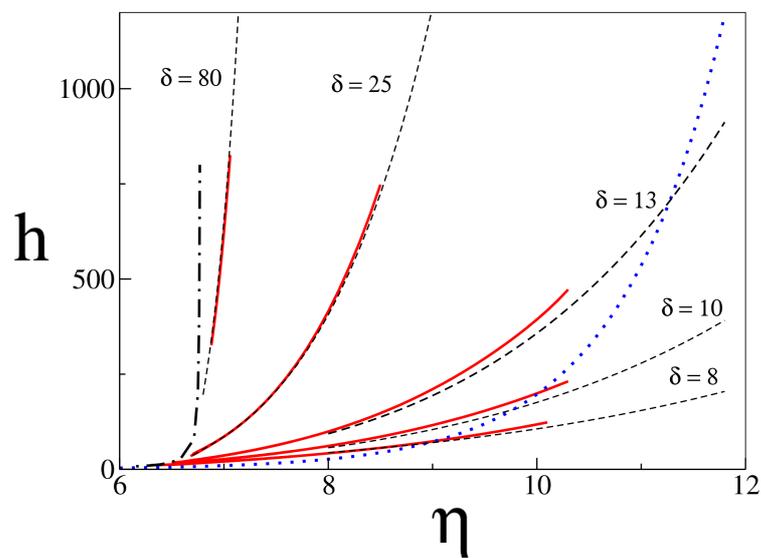


Figura 5.9: Ancho de fajas del perfil hiperbólico para diferentes valores de  $\delta$ . Las líneas continuas corresponden a la solución variacional de las Ecs. (H.2) y (5.21) usando la aproximación (H.8) para los coeficientes de *Fourier* en la energía dipolar. Las líneas de trazos corresponden a la aproximación asintótica dada por las Ecs. (5.25) y (5.26). La línea de puntos corresponde al valor del ancho de fajas sobre la transición entre las fases saturada e *Ising*. La línea de trazos y puntos corresponde al valor del ancho de fajas sobre la reorientación.

# Capítulo 6

## Diagrama de fases a temperatura finita

### 6.1. Diagrama de fases para $\delta = 3$

Los resultados expuestos en esta sección se realizaron en colaboración con los Dra/es.: Mariana-la Carubelli, Orlando Billoni, Daniel Stariolo y Francisco Tamarit [3]. Una descripción detallada de los procedimientos utilizados en la obtención de los mismos están expuestos en la tesis de doctorado de la Dra. Marianela Carubelli [92]. Aquí sólo se mencionan los resultados principales.

La caracterización del sistema a temperatura distinta de cero es realizada a través de la magnetización en el plano:

$$M_{\parallel} \equiv \sqrt{(M_x)^2 + (M_y)^2}, \quad (6.1)$$

donde:

$$M_{x,y,z} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}} \langle S^{x,y,z}(\vec{r}) \rangle \quad (6.2)$$

y  $\langle \dots \rangle$  es el promedio térmico. El parámetro de orden orientacional:

$$O_{hv} \equiv \left\langle \left| \frac{n_h - n_v}{n_h + n_v} \right| \right\rangle \quad (6.3)$$

con

$$n_h = \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}} \{1 - \text{sig}[m^z(r_x, r_y), m^z(r_x + 1, r_y)]\} \quad (6.4)$$

donde  $\text{sig}(x, y)$  es el signo del producto de  $x$  por  $y$ . La definición para  $n_v$  es similar.  $O_{hv}$  toma el valor 1 cuando el sistema presenta fajas verticales u horizontales y 0 para un sistema que presenta simetría de rotación en  $\pi/4$ . Este parámetro guarda algunas diferencias con el definido por Booth *et al.* [53].

Definimos el ancho de fajas como:

$$h = \frac{\pi}{k_{max}} \quad (6.5)$$

donde  $k_{max}$  es el máximo del factor estructura  $|\hat{S}(\vec{k})|^2$  de la componente  $z$  de los espines:

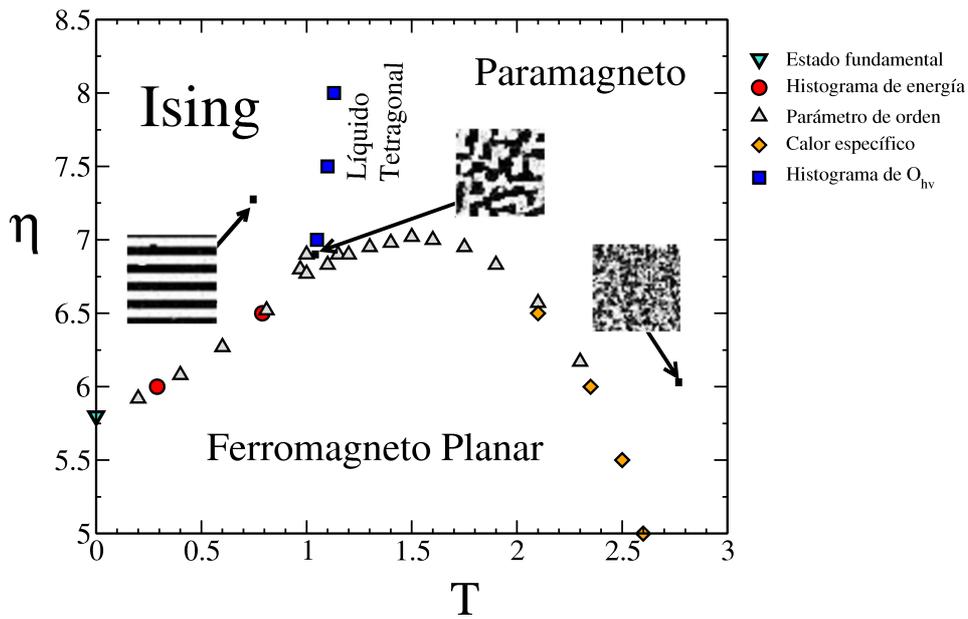


Figura 6.1: Diagrama de fases  $(T, \eta)$  para  $\delta = 3$ . Cada símbolo corresponde a un método de cálculo diferente. Se exhiben algunas configuraciones típicas de la componente  $S^z$  de los espines. Triángulo verde, cálculo de la energía del estado fundamental; círculo rojo, histogramas de energía; cuadrado azul, histogramas del parámetro de orden de fajas; triángulo blanco, simulaciones de equilibrio y de no equilibrio del parámetro de orden de fajas y diamantes amarillos, cálculos del calor específico. El método de obtención de líneas de transición por el método de histogramas se puede encontrar en [3, 92].

$$\hat{S}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} S^z(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}}. \quad (6.6)$$

El parámetro  $h$  da cuenta de media longitud de onda de la modulación.

En primer lugar, se obtiene el diagrama de fases  $(T, \eta)$  para  $\delta = 3$  que es presentado en la Fig. 6.1. Existen tres fases distintas en el diagrama: fajas en la región de alta anisotropía y baja temperatura; orden ferromagnético en el plano para bajas temperaturas y baja anisotropía y un estado desordenado (paramagnético o tetragonal) para altas temperaturas. El ancho de las fajas para este valor de  $\delta$  es  $h = 4$  a temperatura cero, igual al valor en el modelo *Ising* dipolar (ver Cap. 5). No se observa variación del ancho de fajas con la temperatura para ningún valor de anisotropía.

Para  $\eta > 7$ , las fajas se desordenan mediante una transición de fase a un líquido tetragonal (ver Cap. 2). Ésta es de primer orden, en concordancia con resultados anteriores [68] y converge asintóticamente al valor esperado  $T \approx 1,2$  para  $\eta$  grande. A temperaturas aún mayores, el sistema pasa a una fase paramagnética sin mediar transición de fase. Los resultados coinciden con lo observado en el Cap. 4 para  $\eta \rightarrow \infty$ . En la franja  $6,7 \leq \eta \leq 7$ , el sistema sufre una transición de fajas a líquido tetragonal y luego experimenta una reorientación, ordenando en el plano. A temperaturas mayores se obtiene una transición de ferromagneto en el plano a paramagneto. La presencia del líquido tetragonal mediando entre las fases perpendicular y planar puede explicar el

gap paramagnético que se menciona en los trabajos experimentales, como fuera mencionado en el Cap. 2.1. Esto parece deberse a que los aparatos de medición, si bien poseen la suficiente resolución espacial para distinguir distintos dominios, no poseen suficiente resolución temporal, generando imágenes de las muestras que son promedios sobre largos intervalos de tiempo. Como el líquido tetragonal es una fase que no posee orden posicional, el promedio temporal da como resultado la imagen de un paramagneto (ver [3, Fig. 3]). La evidencia recogida para valores de  $\eta < 7$  no alcanza para aseverar que la transición fajas-tetragonal es de primer orden, incluso cabe la posibilidad de que exista una fase nemática entre medio, acorde a uno de los escenarios descritos por Abanov *et al.* [52]. Evidencias en este sentido ya se han discutido en el Cap. 2. En la región  $5,8 < \eta < 7$  la transición de reorientación es abrupta, sin existencia de una fase intermedia. Visto en el diagrama de fases, la pendiente de esta línea de transición es positiva, en coincidencia con otros resultados teóricos [74, 75]. Al aumentar el espesor  $d$  de la muestra la contribución de la interacción dipolar aumenta debido a su dependencia volumétrica. La contribución proveniente de la anisotropía uniaxial, al depender de la interfase, se mantiene aproximadamente constante. Por lo tanto, es razonable considerar un modelo fenomenológico en el cual la variación del espesor se comporta como la inversa de la anisotropía. De esta manera, si la reorientación posee pendiente positiva en el diagrama  $(T, \eta)$ , tiene pendiente negativa en el diagrama  $(T, d)$ , hecho que se comprueba experimentalmente [30, 37, 39, 43, 45]. Respecto al tipo de transición, la evidencia numérica recabada mediante histogramas de energía indican claramente que esta transición es de primer orden en concordancia con las evidencias experimentales [40].

La transición de ferromagneto en el plano a paramagneto muestra un máximo en  $\eta = 7, T = 1,5$  al igual que los resultados experimentales [39]. Si bien no caracterizamos esta transición completamente, es de esperar un comportamiento diferente a ambos lados de este punto. Los datos arrojados por las simulaciones sugieren que del lado derecho del punto la transición es de segundo orden, lo cual indicaría un posible punto tricrítico en el máximo.

## 6.2. Diagrama de fases para $\delta = 6$

Como hemos visto, el comportamiento del modelo a  $\delta = 3$  explica varios resultados experimentales y teóricos pero no reproduce la dependencia con la temperatura y la anisotropía del ancho de fajas. Si se observa la Fig. 5.3, se puede notar que el sistema no presenta variación del ancho de fajas para  $\delta = 3$  en función de  $\eta$ . De acuerdo a los resultados presentados por Pescia *et al.* [74] y Politi *et al.* [75], la variación de la temperatura tiene por efecto la renormalización de las constantes anisotrópica y dipolar. Por lo tanto, la modificación de la temperatura puede ser pensada como una variación del valor de  $\eta$ . Esta propiedad no ha sido debidamente comprobada, aunque es asumida por algunos grupos experimentales [21]. Aceptando esta hipótesis, la inexistencia de variación del ancho de fajas con la temperatura es consistente con el diagrama a temperatura cero. En el caso del modelo de *Ising* dipolar, no observamos variación del ancho de fajas en el rango que se extiende hasta  $\delta = 4,2$ . Vindigni *et al.* [88], realizaron simulaciones para valores más grandes de  $\delta$  y  $L$  y no observaron este fenómeno.

Quedan dos posibilidades a tener en cuenta: o el valor de  $\delta$  es muy pequeño para observar variación del ancho de fajas con la temperatura o el modelo no es apropiado para la descripción de este fenómeno. Dados los resultados obtenidos a temperatura cero, es natural inclinarse por la primera hipótesis. Desde un punto de vista práctico, es necesario aumentar el valor de  $\delta$  tal que exista una cantidad aceptable de sucesivas transiciones de fajas teniendo en cuenta que, para

valores de  $\delta$  mayores, son necesarios sistemas más grandes para evitar efectos de borde. El valor que escogemos es  $\delta = 6$ . Según el diagrama de fases a temperatura cero (Cap. 5), el ancho de fajas cubre el rango  $h = [8, 18]$  en función de la anisotropía. Por otro lado, las fajas son de anchos que pueden ser simulados en redes de tamaño  $L = 120$ . Los resultados detallados en este capítulo fueron obtenidos en colaboración con los Dres.: Orlando V. Billoni y Daniel Stariolo [4].

En esta sección se comienza el análisis de las propiedades del modelo de *Heisenberg* a  $\delta = 6$  en donde una nueva fenomenología emerge. Un nuevo diagrama de fases es calculado, el cual se empleará para extrapolar los resultados a valores de  $\delta$  arbitrarios y así establecer comparaciones con los sistemas reales. También servirá como punto de partida para el análisis de la variación del ancho de fajas con la anisotropía y la temperatura.

### 6.2.1. Protocolos de simulación

Dos protocolos de simulación han sido utilizados a lo largo de este trabajo. Para su identificación los llamaremos: “escalera” y VPTC (variación de parámetro a tasa constante). Dependiendo de las necesidades, éstos se aplican a alguno de los parámetros del modelo, como ser la temperatura  $T$  o la anisotropía  $\eta$ . El protocolo escalera es usado en general para obtener curvas de equilibrio del sistema. Se parte de una configuración cercana al equilibrio (correspondiente al estado fundamental a bajas temperaturas o al estado paramagnético a altas temperaturas) y se modifica el valor del parámetro independiente de a saltos discretos. Para el caso de la temperatura, por ejemplo, esta valor se denota de la forma  $\Delta T$ . Por cada nuevo valor, se termaliza un tiempo  $t_e$  y se mide promediando un tiempo  $t_m$ . El tiempo se mide en pasos de Monte Carlo, MCS (Monte Carlo steps), donde un paso corresponde a tantos ciclos del algoritmo de Metrópolis como espines del sistema. La configuración inicial para cada valor del parámetro independiente corresponde a la última configuración del valor previo. El protocolo VPTC consiste en la variación del parámetro independiente linealmente con el tiempo de simulación. Para el caso particular de la temperatura, ésta queda de la forma  $T = T(0) \pm rt$ , donde  $T(0)$  es la temperatura inicial,  $r$  es la tasa de enfriamiento (-) o calentamiento (+) del sistema y  $t$  es el tiempo de simulación medido en MCS. El estado inicial a  $T(0)$  es equilibrado previamente durante un tiempo  $t_e$ . Este tipo de protocolo se utiliza para analizar la dinámica del sistema, estados metaestables o efectos de histéresis (aumentando y disminuyendo la temperatura en forma cíclica). Para ambos protocolos es usual promediar sobre varias realizaciones (muestras) de la simulación para mejorar la estadística de los resultados. Existe la posibilidad de utilizar un protocolo VPTC variando la intensidad del campo magnético planar  $\xi$  (ver Ec. (2.5)). Se elige un punto en el diagrama de fases con coordenadas  $(T, \eta)$  y se aplica un VPTC donde el parámetro que se varía es el campo magnético  $\xi$  que está aplicado en la dirección  $x$ . Preferentemente, el valor del campo inicial debe ser alto. Éste se disminuye paulatinamente hasta alcanzar la condición de campo nulo  $\xi = 0$ . Luego, se deja equilibrar un tiempo  $t_e$  y se mide en los siguientes  $t_m$ . La condición inicial corresponde al sistema saturado en la misma dirección que el campo magnético. Este tipo de simulaciones da muy buenos resultados. Al aplicarlo sobre un punto en la fase de fajas, el campo magnético acuesta los espines sobre el plano produciendo paredes de dominio de bajo costo energético. Como los dominios pueden moverse con más facilidad, es más fácil equilibrar el sistema.

### 6.2.2. Diagrama de fases

Todas las líneas de transición, exceptuando la correspondiente a la transición entre la fase de fajas y la fase paramagnética, son calculadas a través de las curvas de magnetización en el plano en función de  $\eta$ . El protocolo utilizado es el de VPTC en  $\eta$ . Como las simulaciones son costosas computacionalmente, se usan diferentes parámetros de simulación dependiendo de la región del diagrama: las tasas varían entre  $r = 10^{-5}$  y  $10^{-7}$  y el tiempo de termalización inicial oscila entre  $t_e = 10^6$  y  $10^7$ . En todos los casos, la condición inicial corresponde a orden ferromagnético en el plano partiendo de algún punto del intervalo  $\eta = [4, 5]$ . Para disminuir los efectos de borde (especialmente si se desea observar fajas anchas) es necesario ir a tamaños de sistema mayores a los utilizados en el caso  $\delta = 3$ . En la gran mayoría de los casos usamos tamaños que oscilan entre  $L = 80 - 120$ , hay algunas excepciones que son mencionadas oportunamente. El objetivo que se persigue es el de permitir una buena cantidad de fajas dentro del sistema. El costo en tiempo de estos tamaños hacen imposible un estudio termodinámico detallado como el presentado para el caso  $\delta = 3$ . El diagrama de fases  $(T, \eta)$  a  $\delta = 6$  es presentado en la Fig. 6.2. En él distinguimos las fases de fajas (*Ising* y *canted*), la fase ferromagnética en el plano y la fase paramagnética. Sobre el eje de las ordenadas marcamos las transiciones entre diferentes anchos de fajas obtenidos de los resultados de temperatura cero del Cap. 5.

Hay una diferencia cualitativa entre este diagrama y el correspondiente a  $\delta = 3$  en la fase de baja temperatura: la aparición de una extensa región del diagrama correspondiente a una fase *canted*. La transición de reorientación y la transición entre fajas *Ising* y fajas *canted* convergen a la línea de transición entre orden ferromagnético en el plano y paramagneto (o líquido tetragonal).

No hay un corrimiento marcado en el valor de anisotropía correspondiente a la transición de reorientación a temperatura cero. Esto es de esperar ya que el diagrama de fases a temperatura cero muestra como  $\eta_{SRT}(\delta) \rightarrow 6,775$  para valores de  $\delta$  suficientemente grandes (ver Ec. (5.17)). Este valor corresponde a la transición entre los estados monodominio planar y perpendicular, por lo que es razonable pensar que se mantendrá constante al incrementar  $\delta$ . Una magnitud útil a la hora de entender el comportamiento de las líneas de transición es la anisotropía efectiva  $\eta_{ef}$ . Ésta se define de la forma  $\eta_{ef} = \eta - \eta_{SRT}(\delta, T = 0)$ . Cuando  $\eta_{ef} > 0$  el sistema presenta orden perpendicular, y cuando  $\eta_{ef} < 0$  el sistema presenta orden en el plano a temperatura cero. La Ec.  $\eta_{ef} = 0$  representa la condición en la cual la anisotropía uniaxial, tendiente a alinear los espines de manera perpendicular a la red, iguala a la anisotropía producida por la interacción dipolar, que tiende a llevarlos al plano.

A temperatura finita, la transición de reorientación tiene pendiente positiva, i.e., la reorientación está por encima de la línea  $\eta_{ef} = 0$  en el diagrama  $(T, \eta)$ . Este comportamiento se puede entender en términos entrópicos: sobre la línea  $\eta_{ef} = 0$  las energías internas de las fases planar y perpendicular son iguales. Sin embargo, el sistema planar tiene simetría ante rotaciones continua en el plano, mientras que la fase perpendicular tiene simetría en  $\pi/2$ . Por lo tanto la fase planar posee más direcciones equivalentes en las cuales ordenarse. La contribución entrópica de la fase planar es mayor que la contribución de fajas, por lo que los puntos a temperatura finita sobre la línea  $\eta_{ef} = 0$  presenta orden ferromagnético en el plano. Esto determina que la transición de reorientación se halle sobre esta línea. Un análisis cuantificado es presentado en la literatura, en él se predice un comportamiento lineal de pendiente positiva de la temperatura de reorientación en el diagrama  $(T, \eta)$  [74, 75].

Con respecto al comportamiento de la transición entre la fase planar y la fase paramagnética no hay, dentro de nuestro conocimiento, información en la literatura. De todas formas, podemos

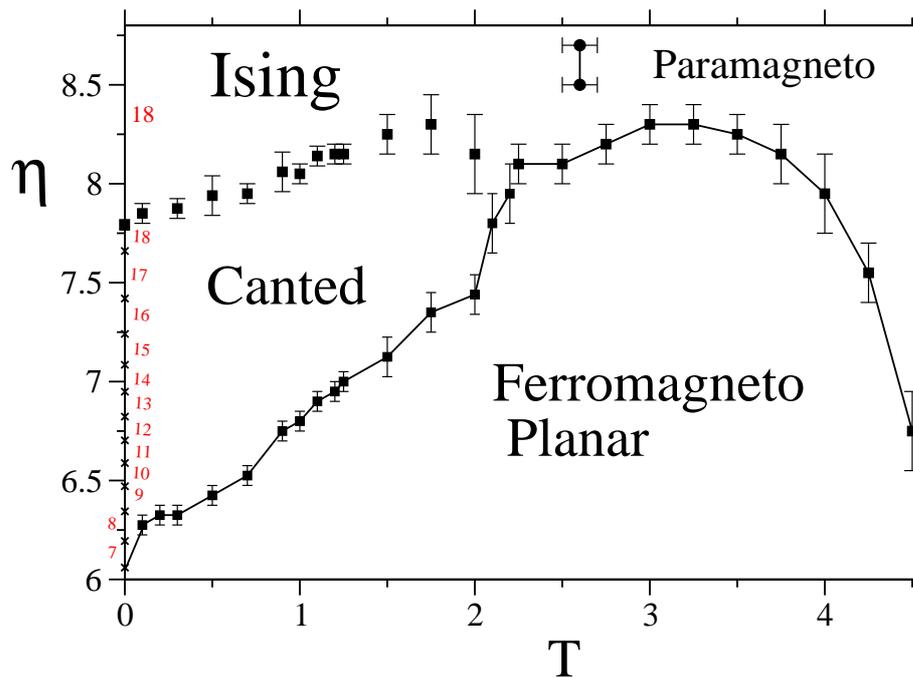


Figura 6.2: Diagrama de fases  $(T, \eta)$  para  $\delta = 6$ . Los puntos cuadrados son obtenidos de las curvas de magnetización en el plano calculadas con protocolo VPTC en  $\eta$ . Los parámetros de simulación dependen de la temperatura: a temperatura  $T = 0,1$ ,  $L = 120$  y  $r = 10^{-7}$ ; entre los rangos  $0,1 < T < 3$ ,  $L = 80$  y  $r = 10^{-6}$  y para  $T > 3$ ,  $L = 80$  y  $r = 10^{-5}$ . En todos los casos se parte de un estado equilibrado por debajo de la reorientación. Los puntos circulares se determinan mediante un protocolo escalera en temperatura partiendo de un estado desordenado a alta temperatura. Los parámetros de la simulación son:  $L = 120$ ,  $\Delta T = 0,1$ ,  $t_e = 10^5$  y  $t_m = 10^5$ . Con cruces se grafican las transiciones entre fajas obtenidas de la minimización de la energía.

argumentar que la pendiente de la curva es la correcta de manera sencilla. La disminución de la anisotropía uniaxial  $\eta$  genera un aumento de la contribución de la anisotropía generada por la interacción dipolar. Esto hace que los espines sean atraídos más fuertemente hacia el plano lo que produce un aumento en la temperatura de desorden.

La transición entre las fases paramagnética y fajas *Ising*, es difícil de estimar dadas nuestras actuales capacidades de cálculo ya que las regiones de alta anisotropía poseen dinámica muy lenta. Por eso, sólo la posición de dos puntos de la línea es estimada. Éstos se obtienen del parámetro de orden de fajas ( $O_{hv}$ ) en función de la temperatura calculado mediante el protocolo escalera en la temperatura. La simulación se lleva a cabo en un sistema de tamaño  $L = 80$  con parámetros de simulación  $t_e = 10^4, t_m = 10^4, \Delta T = 0,1$  partiendo de un estado equilibrado a temperatura  $T = 4$ .

Ahora haremos un pequeña descripción de las curvas de magnetización en el plano  $M_{||}$  y parámetro de orden orientacional  $O_{hv}$  que se utilizan para la confección del diagrama de fases de Fig. 6.2. También mostraremos la manera en que determinamos las líneas de transición. Curvas típicas de la magnetización en el plano  $M_{||}$  y del parámetro de orden orientacional  $O_{hv}$  en función de  $\eta$  se muestran en la Fig. 6.3. Las curvas correspondientes a  $T = 0$  son las calculadas mediante el mínimo de la energía (ver Cap. 5). Claramente, las curvas de magnetización correspondientes a las temperaturas  $T = 0,1; 1$  poseen un comportamiento diferente a la curva  $T = 2,5$ . Tomemos como ejemplo la curva de la magnetización a temperatura  $T = 0,1$ . A baja anisotropía, decrece suavemente y posee curvatura negativa (tomamos como positiva la curvatura de la función  $x^2$ ). En  $\eta = 6,25$  hay un punto de inflexión, este es el valor que le asignamos a la transición de reorientación ya que se corresponde con el punto de inflexión en  $O_{hv}$  que indica la presencia de fajas. A temperatura cero, el punto de inflexión se ubica exactamente sobre la reorientación ( $\eta = 6,05$ ). A valores mayores a  $\eta = 6,25$  la curvatura es positiva hasta  $\eta = 7$ , donde vuelve a cambiar de signo. En este rango de valores tanto  $M_{||}$  como  $O_{hv}$  son distintos de cero, lo que indica la presencia de una fase canted o saturada. El nuevo punto de inflexión podría estar relacionado con el cambio del término dominante en el *Hamiltoniano*. Por encima de éste la anisotropía uniaxial prevalece sobre la interacción dipolar. Esto se vería reflejado en fajas con perfiles cuadrados y poca variación del tamaño de los dominios debido al alto costo de las paredes. Por debajo de este punto el sistema estaría dominado por la interacción dipolar que genera perfiles suaves y de bajo costo que permiten la movilidad de las paredes. De ser esto cierto, el punto  $\eta = 7$  representaría un “crossover” entre los dos tipos de comportamiento. Esta hipótesis ya ha sido expuesta para explicar algunos resultados experimentales en [45]. En  $\eta = 7,8$  hay un nuevo punto de inflexión, esta vez relacionado con la transición entre fajas canted -o saturadas- y fajas *Ising* como se puede comprobar comparando con la curva de magnetización a  $T = 0$ . Debido a las limitaciones de las simulaciones no es posible discernir entre fase canted y saturada -si es que hubiera presencia de ambas para este valor de  $\delta$  relativamente pequeño. A partir de ahora, toda la región de fajas con magnetización en el plano será tratada como canted. Por otra parte, la curva de magnetización a  $T = 2,5$  no presenta esta fenomenología, se observa un único punto de inflexión que está relacionado con la transición entre las fases ferromagnética planar y paramagnética. Antes de continuar es necesario aclarar que si bien nos referimos a fase canted y fase *Ising*, nuestras simulaciones no nos permiten detectar la existencia de una transición de fase en el sentido termodinámico. Whitehead *et al.* [64] calculan el calor específico en función de la temperatura y de la anisotropía para el mismo modelo con  $\delta = 4,45$  [59] y observan la presencia de picos en diferentes temperaturas separando las fases ferromagnética en el plano, canted e *Ising*.

Antes de presentar al diagrama de fases, mencionamos algunas diferencias entre las curvas de magnetización  $M_{||}$  para los casos  $\delta = 3$  y  $\delta = 6$ . En la Fig. 6.4 graficamos  $M_{||}$  en función de la

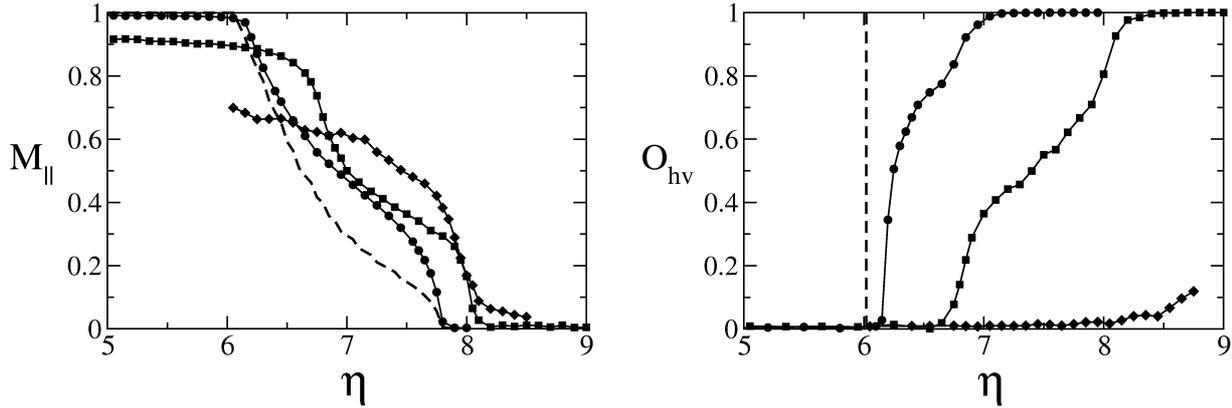


Figura 6.3: Magnetización en el plano (a) y parámetro de fajas (b) en función de la anisotropía para temperaturas  $T = 0,1$  ( $\bullet$ );  $T = 1,0$  ( $\blacksquare$ ); y  $T = 2,5$  ( $\blacklozenge$ ) y tamaño de red  $L = 80$  realizados mediante VPTC con condición inicial ferromagnética en el plano y tasa  $r = 10^{-6}$ . La línea cortada corresponde al cálculo a temperatura cero.

anisotropía para las temperaturas  $T = 0$  y  $0,1$ . Se puede apreciar la diferencia cualitativa entre los dos valores del intercambio.

A  $\delta = 3$  y  $T = 0,1$  la magnetización en el plano no presenta cambio de curvatura, por lo que no hay fase canted a temperatura  $T = 0,1$  como en el caso de  $\delta = 6$ . Sin embargo, en el diagrama de fases a temperatura cero, ver Cap. 5, se puede apreciar una pequeña región de fase canted. Por lo tanto, hay una pequeña región canted en el diagrama  $\delta = 3$  para temperaturas  $T < 0,1$ . Si se mira con detenimiento el Inset de Fig. 6.4 existe una pequeña anomalía en el comportamiento de  $M_{\parallel}$  a  $T = 0,1$ . A temperaturas mayores este efecto no es observado. La existencia de una pequeña región canted no fue considerada en la confección del diagrama de fases para  $\delta = 3$ . El punto correspondiente a la reorientación a temperatura cero de ese diagrama se calculó comparando la energía del ferromagneto en el plano con la de las fajas *Ising*. Considerando la presencia de faja canted, la transición a temperatura cero se situaría en  $\eta = 5,5$ .

### 6.3. Diagrama de fases para $\delta$ arbitrario: escaleo de variables con $\delta$

Vemos ahora como los resultados de la sección anterior pueden ser extrapolados a valores arbitrarios de  $\delta$ . La contribución a la energía dipolar dada por un perfil de fajas crece como el volumen de la muestra. La anisotropía uniaxial, en cambio, crece con la superficie de la muestra dado que depende de las interfaces de la lámina (para más detalles ver 2 y [57, Ec.(12)]). Esto es consistente con las imágenes de láminas de espesor variable (ver Cap. 2) según las cuales, al aumentar el espesor, el ancho de fajas disminuye y el sistema se acerca a la reorientación. Observando el diagrama de fases a temperatura cero de Fig. 5.3 observamos que un aumento de espesor presenta la misma fenomenología que una disminución de la anisotropía uniaxial. Con esta evidencia es que proponemos que la anisotropía uniaxial se comporta de la forma  $\eta \sim 1/d$ . En el diagrama (A) de la Fig. 6.5 (ver también [3]) aplicamos esta hipótesis a los resultados obtenidos con el diagrama

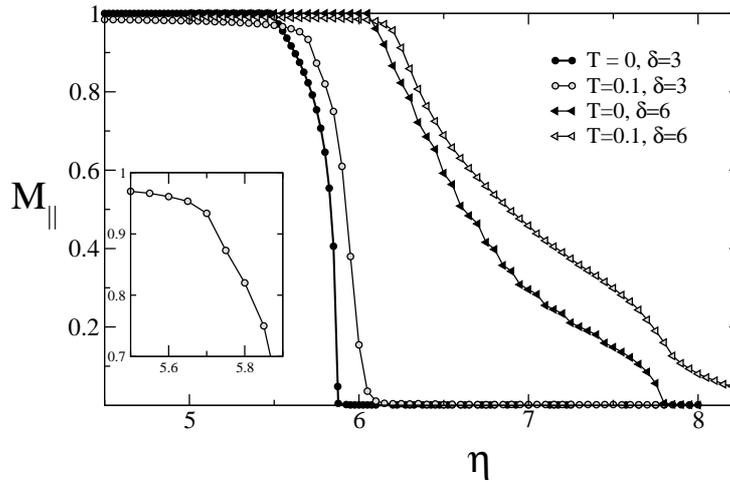


Figura 6.4: Magnetización en el plano para  $\delta = 3$  (círculos) y  $\delta = 6$  (triángulos) para dos temperaturas distintas calculadas mediante Monte Carlo a temperatura cero y VPTC en  $\eta$  para  $T = 0, 1$ . Los cálculos correspondiente a  $\delta = 3$  se realizan sobre un sistema  $L = 120$  con tasa de simulación  $r = 10^{-6}$  y estado inicial ferromagnético en el plano a  $\eta = 4$  equilibrado con  $t_e = 10^6$ . Para el caso  $\delta = 6$  sólo cambian la tasa  $r = 10^{-7}$ , y la termalización inicial  $t_e = 10^7$ . (Inset) anomalía observada en la curva correspondiente a  $\delta = 3, T = 0, 1$  debido a una pequeña región canted.

de fases para  $\delta = 3$ . El diagrama **(B)** es el de una lámina de Fe/Ni(5.4ML)/Cu(001) medido por Won *et al.* [45]. Las líneas de transición son obtenidas mediante inspección visual de los dominios magnéticos en láminas de espesor variable para diversas temperaturas. Para evitar inestabilidades estructurales en la lámina de hierro, se deposita previamente una capa de níquel. El níquel posee anisotropía uniaxial planar que se vuelve dominante en el sistema cuando la capa de hierro es muy delgada. Por ello, la porción del diagrama de fases que nos interesa se encuentra a espesores mayores que el indicado por la flecha. El gráfico **(C)** corresponde a una lámina de Fe/Cu<sub>3</sub>Au(100) medida por Baudelet *et al.* [37]. Las líneas de transición se calculan con mediciones de la magnetización remanente. Esto se puede hacer porque esta lámina ordena en un estado monodominio perpendicular a bajas temperaturas. La disminución de la temperatura de Curie en función del espesor se debe a razones que escapan a nuestro modelo y que se encuentran especificadas en ese trabajo. Por último, el diagrama **(D)** corresponde a una lámina de Fe/Ni(2ML)/W(110) obtenido por Arnold *et al.* mediante mediciones de susceptibilidad magnética [39]. En este experimento el níquel produce el efecto mencionado anteriormente y el diagrama se debe mirar para espesores mayores a los indicados por la flecha. De la comparación de las gráficas se puede observar un acuerdo general. La fase perpendicular se sitúa a bajas temperaturas y a valores de espesor  $d$  pequeño. Para láminas con mayor espesor se encuentra orden ferromagnético en el plano. Por último, la fase paramagnética a alta temperatura. Tanto en **(A)** como en **(B)** la presencia de dominios de fajas es evidente, en **(C)** y **(D)** se detectan dominios magnéticos en una amplia región cercana a la reorientación. En la región de mayor espesor, la transición se da entre la fase planar y el paramagneto. Para espesores intermedios, el sistema pasa por una reorientación de la dirección de magnetización de perpendicular a planar y, finalmente, al desorden. Para films muy delgados, la

transición entre el orden perpendicular y el desorden es directo. En los diagramas (A), (B) y (D) se observa reentrancia de la fase desordenada que media entre el orden planar y el perpendicular. En (C) esto no se observa, aunque el error del experimento no permite descartar esta posibilidad. En el diagrama (D) los autores señalan la existencia de un punto al que llaman multicrítico que se haya en algún lugar de la región señalada con el círculo. En este punto se intersectan las fases perpendicular, planar y paramagnética. A espesores menores los autores no pueden definir una temperatura de desorden.

Ahora nos proponemos encontrar una ley de escala para las líneas de transición que nos permita extender los resultados de nuestras simulaciones a los rangos de valores de los parámetros observados en los experimentos. Como a  $\delta$  suficientemente grande la interacción de intercambio predomina sobre las otras, es de esperar que la temperatura crítica correspondiente a las transiciones de reorientación, fajas-paramagneto y planar-paramagneto escalen con  $\delta$ . Por otro lado, en lugar de graficar la anisotropía uniaxial  $\eta$  rescalada en  $\delta$ , graficamos  $\eta_{ef}/\delta$  ya que este valor contiene la contribución de la anisotropía uniaxial y la anisotropía generada por la interacción dipolar. Por lo que, en la Fig. 6.6A, se grafica  $\eta_{ef}/\delta$  en el eje de las ordenadas y  $T/\delta$  en el de las abscisas.

En rasgos generales, se observa que las líneas de transición presentan un buen colapso. La transición de reorientación muestra un buen ajuste al igual que la transición entre las fases planar y paramagnética. Las líneas que separan a las fajas de la fase paramagnética no colapsan. Es probable que los valores de  $\delta$  utilizados sean demasiado pequeños y las curvas no hayan entrado en el régimen de  $\delta$  grande. En este sentido es evidente que el corrimiento de las curvas es monótono en  $\delta$ . La curva de transición entre las fases canted e *Ising* no responde a la ley de escala, hecho que es de esperar dados los resultados obtenidos a temperatura cero. Para  $\delta$  suficientemente grande, la fase canted se reduce a una pequeña región cerca de la reorientación. El punto en el cual se unen la línea de reorientación y la línea de transición ferromagneto planar-paramagneto muestra un buen acuerdo para todos los valores de  $\delta$ . Por lo tanto, la temperatura y el valor de anisotropía al que se encuentra este punto crece linealmente en  $\delta$ . Esto implica que el rango de anisotropías en el cual se encuentra la reorientación crece con  $\delta$ . La anisotropía uniaxial del sistema depende, entre otras cosas, del espesor de la lámina. El hecho de que el rango de anisotropías sea grande implica que el rango de espesores a los que puede observarse reorientación mediante un barrido en temperatura es grande. Esto explica porqué esta región es factible de ser observada en los experimentos. Lo mismo puede decirse con la temperatura, existe un rango de temperaturas que crece linealmente con  $\delta$  en el cual se puede observar la reorientación variando el espesor de la muestra.

Incluimos en la Fig. 6.6 los datos obtenidos del trabajo de Whitehead *et al.* para  $\delta = 4,45$  [64] (ver la salvedad hecha en [59]). Para el cálculo de las líneas de transición Whitehead *et al.* usan la magnetización en el plano y el parámetro de orden de fajas. Sin embargo, definen la transición a través de un valor de corte que no es especificado. Como en este trabajo las transiciones se definen en el punto de inflexión de la componente de magnetización en el plano, usamos las curvas de magnetización en el plano calculadas en el citado trabajo para recalcular el diagrama a  $\delta = 4,45$ . A bajas temperaturas, los puntos de la curva de transición planar-paramagneto para  $\delta = 4,45$  no son confiables y son desechados. Esta decisión se toma en base a que los puntos de transición calculados con las curvas  $M_{||}$  en función de la temperatura discrepan de los calculados con las curvas  $M_{||}$  en función de la anisotropía.

Comparamos ahora el diagrama de fases escaleado con los resultados experimentales que ya describimos. La curva teórica se construye tomando los puntos del escaleo para  $\delta = 3; 4,45; 6$  en

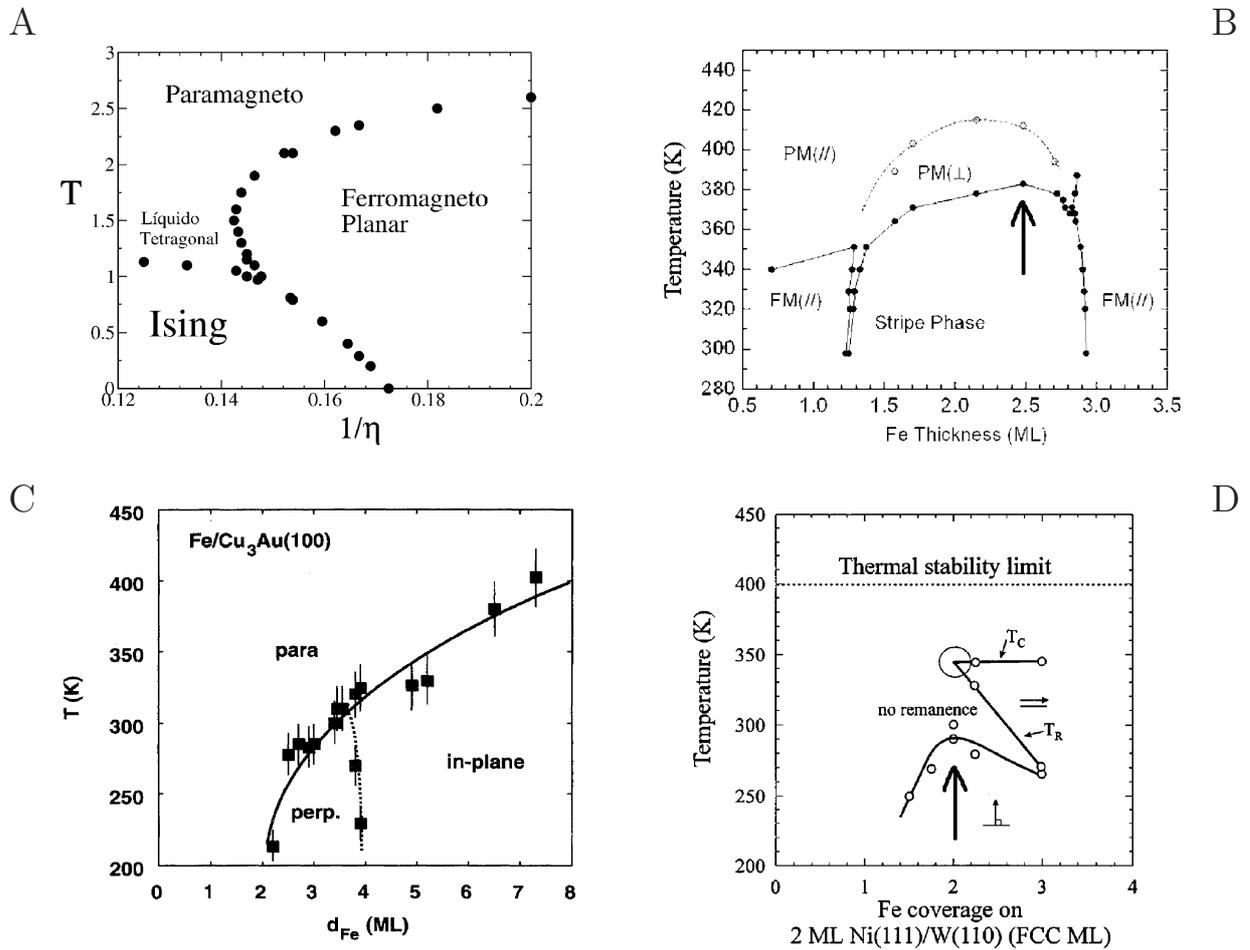


Figura 6.5: Comparación entre diagramas de fases teóricos y experimentales. (A) Diagrama de fases  $T$  vs.  $1/\eta$  para  $\delta = 3$ . (B) Diagrama de fases ( $T, d$ ) para una lámina de Fe/Ni(5.4 ML)/Cu(001) [45]. (C) Diagrama de fases ( $T, d$ ) para una lámina de Fe/Cu<sub>3</sub>Au(100) [37]. (D) Diagrama de fases ( $T, d$ ) para una lámina de Fe/Ni(111)(2 ML)/W(110) [39]. Para espesores menores a los señalados por la flecha, la anisotropía planar del níquel se vuelve dominante.

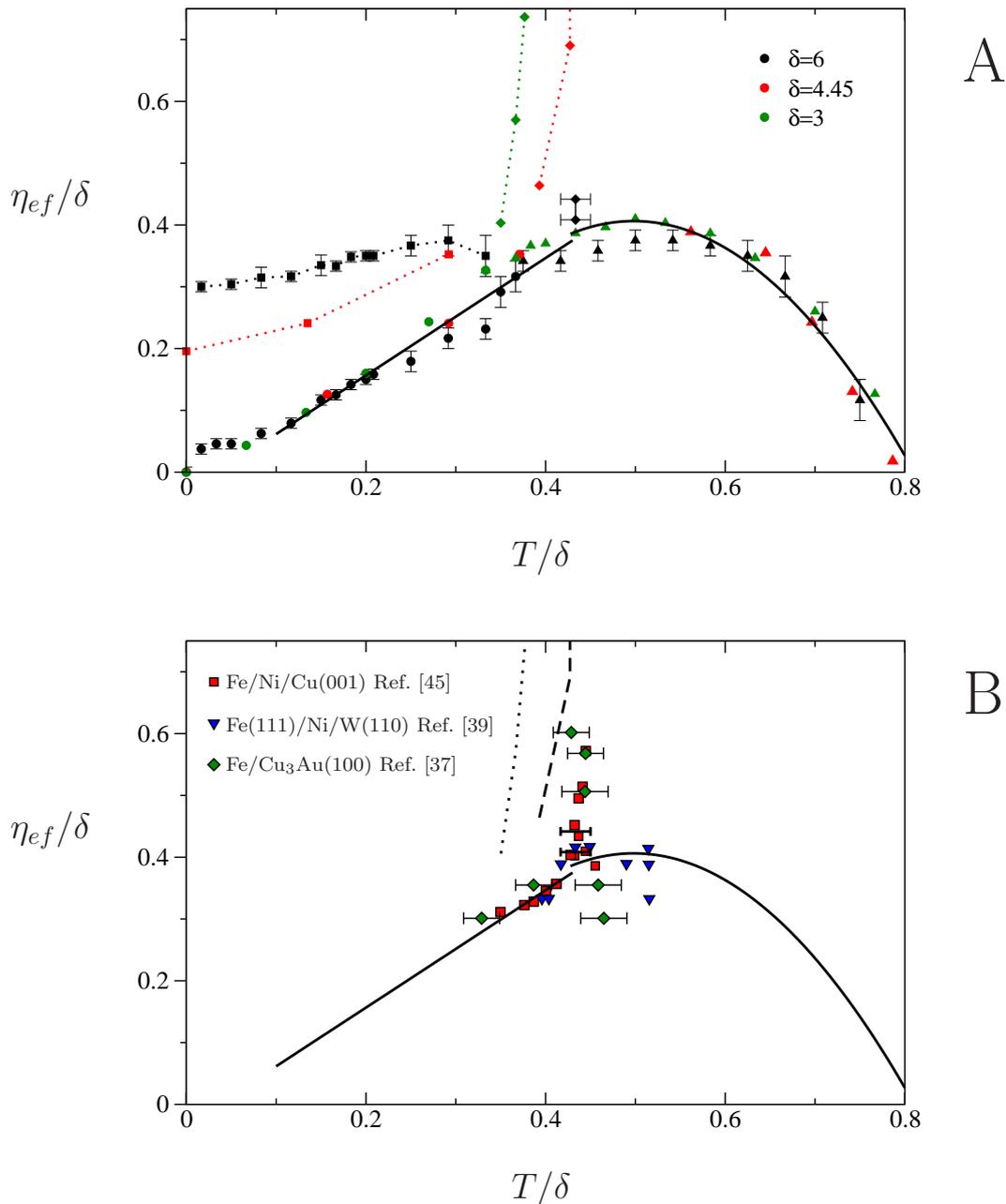


Figura 6.6: (A) Leyes de escala emergentes de los diagramas de fase  $\delta = 3$ ; 4,45 y 6 al graficarlos sobre los ejes  $(T/\delta, \eta_{ef}/\delta)$ . El color verde corresponde a  $\delta = 3$ , el color rojo a  $\delta = 4,45$  (extraído de la Ref. [64]) y el color negro a  $\delta = 6$ . La transición de reorientación está graficada con círculos, la transición canted-fajas *Ising* con cuadrados, la transición ferromagneto planar-paramagneto con triángulos y la transición fajas *Ising*-paramagneto con rombos. Las curvas negras continuas representan dos ajustes realizados sobre la línea de reorientación en un caso y sobre la transición ferromagneto planar-paramagneto en el otro. Las líneas de puntos son una guía para el ojo. (B) Leyes de escala emergentes de los diagramas de fase experimentales graficados sobre los ejes  $(T/\delta, \eta_{ef}/\delta)$ . Las líneas negras continuas son los ajustes a las curvas de reorientación y planar-paramagneto mostradas en (A). La transición fajas *Ising*-desorden se grafica en negro, para  $\delta = 3$  en línea de puntos, para  $\delta = 4,45$  en línea de trazos y con dos barras de error para  $\delta = 6$ . En el Inset figuran las láminas sobre las que se aplicaron las leyes de escala.

forma indiscriminada. Ajustamos una recta a la transición de reorientación y una ley de potencia a la transición entre las fases planar y paramagnética. De esta forma es posible tener una idea aproximada del lugar en donde se encuentra el punto de unión entre las dos transiciones. Los trabajos experimentales que se analizan son los ya mencionados para Fe/Ni/Cu(001) (Ref. [45, Fig. 5]), Fe/Cu<sub>3</sub>Au(100) (Ref. [37, Fig. 4]) y Fe/Ni(111)(2 ML)/W(110) (Ref. [39, Fig. 3]). En primer lugar, hay que escribir las unidades experimentales en términos de las nuestras. La temperatura en las simulaciones de Monte Carlo están medidas en unidades de  $k_B$ , que es la constante de Boltzmann y de  $g$ , que es la intensidad de la interacción dipolar. La constante de intercambio es  $\delta = J/g$ . Al escalar la temperatura, obtenemos:

$$\frac{T}{\delta} = \frac{k_B T_{Exp}/g}{J/g} = \frac{T_{Exp}}{J/k_B} \quad (6.7)$$

donde  $T_{Exp}$  es la temperatura medida en grados Kelvin. Sobre la anisotropía aplicamos la hipótesis  $\eta \sim 1/d$ , por lo que podemos expresar la anisotropía efectiva como una función lineal en  $1/d$ . Tomando los valores experimentales se grafica  $a/d + b$  en función de  $T_{Exp}/\alpha$  para  $a, b, \alpha$  elegidos de tal manera de obtener el mejor ajuste posible. Los resultados son expuestos en la Fig. 6.6B. Los valores de  $\alpha$  obtenidos son  $\alpha_{Fe/Ni/Cu} = 850$ ,  $\alpha_{Fe/Ni/W} = 670$   $\alpha_{Fe/Cu_3Au} = 700$ . Estos se deben comparar con los valores de  $J/k_B$  que son difíciles de estimar porque, en particular, dependen fuertemente de la estructura de la red. De todos modos se pueden establecer ciertas cotas para los valores. En el caso de la lámina mixta de Fe/Ni la cota inferior la obtenemos de una única monocapa de Fe [45], quedando:

$$\frac{J_{Fe}}{k_B} = \frac{36 \text{ meV}}{8,617 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}} \approx 420 \text{ K}. \quad (6.8)$$

Para la cota superior incluimos el aporte de las dos láminas, siguiendo la estimación presentada en el mismo trabajo:

$$\frac{J_{Fe}}{k_B} = \frac{36 \text{ meV} \times 2,9 \text{ ML} + 4,6 \text{ meV} \times 5,4 \text{ ML}}{8,617 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}} \approx 1500 \text{ K}. \quad (6.9)$$

Con lo cual los valores que obtuvimos para ambos experimentos se encuentran dentro de la cota. Hay que aclarar que las estimaciones hechas no tienen en cuenta varios fenómenos que ocurren en los experimentos y que cambian el valor efectivo de la constante de intercambio.

## 6.4. Variación del ancho de fajas

Como ya hemos mencionado, uno de los propósitos por el cual calculamos el diagrama de fases a  $\delta = 6$  es intentar observar la variación del ancho de fajas en función de alguno de los parámetros del *Hamiltoniano*. El diagrama de fases calculado en el Cap. 6.2 muestra las líneas de transición entre las diferentes fases ordenadas. Hasta el momento, no se ha hecho ningún análisis de lo que ocurre en la fase de fajas a excepción de indicar las líneas de transición entre fajas a temperatura cero calculadas en el Cap. 5. Con esta información se comienza el estudio de la variación del ancho de fajas. Para ello se prueban diversos protocolos aplicados a la temperatura y a la anisotropía más un método de termalización con campo magnético en el plano.

### 6.4.1. Variación del ancho de fajas con la temperatura

Comenzamos el estudio de la dependencia del ancho de faja con la temperatura en la región canted. Este criterio se basa en que las paredes en la fase canted son de bajo costo energético, por lo tanto son más fáciles de equilibrar. Las simulaciones en la región de fajas *Ising*, en cambio, demandan más tiempo por lo que no se analizan en este trabajo sus propiedades. Usando el protocolo escalera en la temperatura a campo magnético nulo, se realiza una corrida para  $\eta = 7,5$  y se guarda la configuración del sistema para varias temperaturas. El tamaño de la red simulada es  $L = 120$ , se parte con estado inicial equilibrado a  $T = 3$ , se desciende en temperatura de a saltos  $\Delta T = 0,1$  y cada punto es termalizado un tiempo  $t_e = 2 \times 10^3$ . En la Fig. 6.7 se exhiben las configuraciones obtenidas a temperaturas  $T = 0,1; 1; 1,5; 2$ . Cada columna de la figura representa una temperatura distinta, la fila superior representa la componente  $x$  de  $\vec{S}$ , la del medio la componente  $y$  y la inferior la componente  $z$ . Las configuraciones están representadas en tonos de grises, tal como se muestra en la escala de la derecha y los ejes de coordenadas están dibujados a la izquierda, con  $z$  saliente del plano de la hoja. Cuando el valor de la componente de un espín es 1, se lo representa con un píxel blanco, cuando es  $-1$  se lo representa con un píxel negro.

A temperatura  $T = 2$ , sobre la fase ferromagnética en el plano, se puede observar la presencia de dominios en la componente perpendicular al plano. La componente  $S^y$  presenta un color homogéneo oscuro debido a que la magnetización está en la dirección del eje  $y$ . La componente  $x$  sólo muestra ruido térmico. A temperatura  $T = 1,5$ , claramente se observan dominios de fajas que poseen magnetización orientada preferentemente en la dirección perpendicular. Se aprecian muchas fluctuaciones y dislocaciones. La componente  $S^y$  exhibe líneas delgadas entre los dominios observados en  $S^z$ . Estas líneas son las paredes de las fajas. Para  $T = 1$  este fenómeno es más evidente, las líneas que se observan en la componente  $S^y$  son todas de un gris muy oscuro, lo que indica que las paredes tienen una componente importante en el plano. Tanto la componente  $S^y$  de los espines de la pared, como el sentido en el cual se extienden las fajas, coinciden con la dirección de  $M_{\parallel}$ . Por lo tanto, la magnetización en el plano está generada por la componente en el plano de los dominios y por la contribución de las paredes. El comportamiento por el cual los espines de la pared rotan sobre un eje perpendicular a la pared, corresponde al de una pared de *Bloch*. A temperatura  $T = 0,1$  se pueden observar pequeños dominios en la componente  $S^x$  que se corresponden con las dislocaciones observadas en la componente  $S^z$ . Se realizaron otras simulaciones para  $\eta = 6,5 - 9$ , obteniendo resultados semejantes.

Como cada paso en temperatura está relacionado con el paso anterior, se puede notar que los dominios están claramente anclados a lo largo de toda la simulación. La configuración de bajas temperaturas es cualitativamente la misma que se observa cerca de la transición de reorientación ( $\eta \approx 2$ ). Como diferencias se destacan la disminución del ruido térmico. A bajas temperaturas las paredes siguen caminos menos tortuosos. Por otro lado, si miramos la componente  $S^z$ , la diferencia entre los tonos claros y oscuros de las configuraciones de bajas temperaturas son más marcadas que a altas temperaturas. Esto indica un mayor ordenamiento de los espines. Al no haber movimiento, crecimiento o aniquilación de dominios no hay variación del ancho de fajas. El ancho de fajas promedio de esta secuencia es  $h \approx 11$  (ver Ec. 6.5), muy distinto de  $h = 17$  correspondiente a temperatura cero. Varias hipótesis se pueden barajar acerca del motivo de este comportamiento. Es claro que el tiempo de termalización resulta insuficiente para sacar al sistema del estado metaestable en el que se encuentra. Aumentado el tiempo de termalización a  $t_e = 10^4$  se observan los mismos resultados. Un mayor tiempo de termalización no es posible dados nuestros actuales recursos. Existe la posibilidad de que el sistema esté experimentando

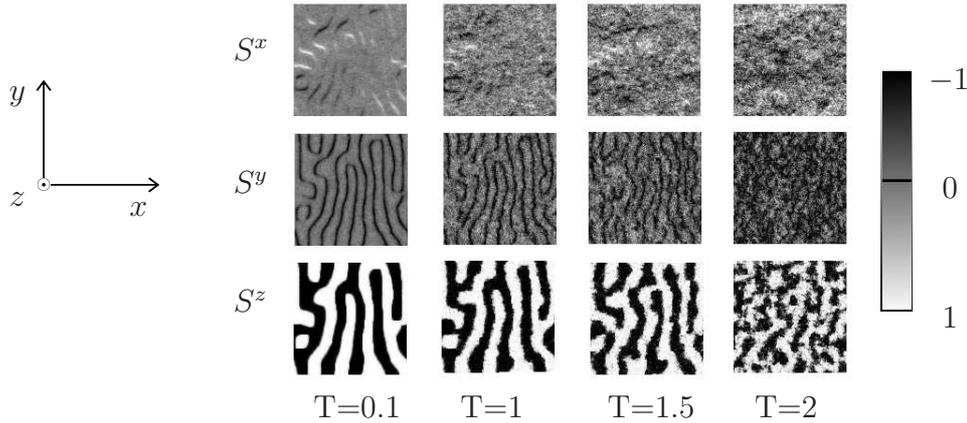


Figura 6.7: Componentes de espín para distintas temperaturas en un sistema  $L = 120$  con  $\eta = 7,5$ . Si la componente en una dada dirección es 1, se la representa con un píxel blanco, si es  $-1$  con un píxel negro, entre estos dos valores se usan tonos grises. Para estos gráficos se emplea un protocolo escalera en la temperatura con tiempo de termalización por punto  $t_e = 2 \times 10^3$  y  $\Delta T = 0,1$ .

fuertes efectos de tamaño finito. Como no es posible simular sistemas más grandes con los tiempos de termalizado indicados, se procede a disminuir la anisotropía uniaxial a  $\eta = 6,5$ . A temperatura cero, el ancho de fajas correspondientes a este valor es de  $h = 10$ . Lamentablemente, los resultados son similares a los ya descritos. Otra posibilidad es que el anclaje del sistema se deba a efectos de borde. Para ello se reemplazan las condiciones periódicas de contorno por condiciones libres. Estas simulaciones son infructuosas ya que la interacción dipolar forma dominios de clausura en el plano tal como ocurre en los sistemas macroscópicos. Estos dominios planares se separan mediante paredes de 90 grados aproximadamente que pueden ser las causantes del anclaje de las fajas. Como se mencionó para el caso anterior, las fajas se extienden a lo largo de la dirección de magnetización de los dominios planares. En la Fig. 6.8 se exhibe la componente perpendicular del espín para temperaturas  $T = 0,1; 1,3; 1,7$  junto con un diagrama en donde consta la dirección de magnetización de los dominios de clausura a temperatura  $T = 0,1$ . Las líneas que separan a los dominios de clausura se confeccionan mediante inspección visual de las componente planar de los espines.

Resumiendo, dentro de las limitaciones computacionales ya expuestas, las únicas variaciones que se aprecian al disminuir la temperatura con este algoritmo son: disminución de la rugosidad de la pared y disminución de la curvatura de las fajas (este efecto se nota especialmente en la componente  $z$  entre las temperaturas  $T = 0,1$  y  $T = 1,5$  de la Fig. 6.7). En conclusión, este protocolo de simulación no es viable para obtener la dependencia del ancho de fajas con la temperatura y otros caminos deben ser explorados.

El paso siguiente es la termalización con campo magnético. Éste es el protocolo con el que se obtienen las configuraciones de fajas más anchas y que mejor se ajustan a los resultados a temperatura cero. Consiste en un VPTC con campo en el plano a temperatura y anisotropía constantes seguido por una termalización a campo nulo. Se parte de una configuración inicial ferromagnética en el plano con campo  $\xi = H_x$  para iniciar la simulación con el sistema cerca del estado de saturación. El campo se reduce hasta cero con tasa  $r$ , se termaliza durante  $t_e$  y se las mediciones se promedian durante  $t_m$ . Si bien el tiempo de cálculo por punto es mayor que en los otros métodos, el hecho de que cada punto se pueda obtener en forma independiente permite la utilización de varios procesadores en paralelo. La principal ventaja de este algoritmo reside en que

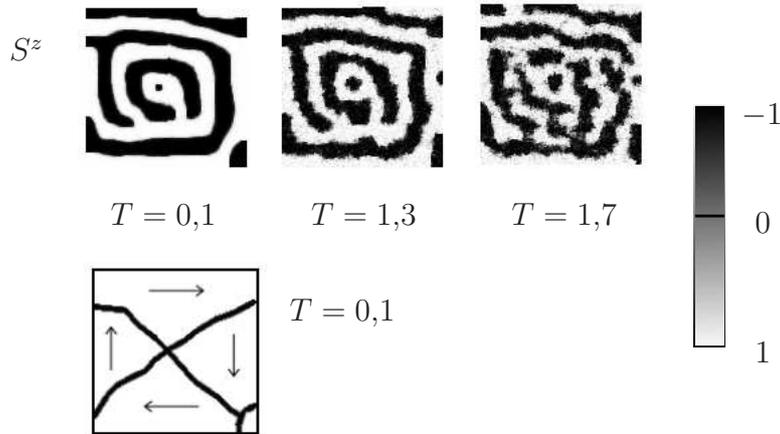


Figura 6.8: Arriba, representación de  $S^z$  en para el mismo sistema que el caso anterior, sólo que ahora se usan condiciones de contorno libres. Se respeta el mismo eje de coordenadas de la figura anterior. Abajo, las líneas indican la separación de dominios con diferente magnetización en el plano, las direcciones están indicadas por las flechas.

reduce la componente perpendicular de los espines aminorando el efecto de la anisotropía. Con la componente perpendicular de los espines pequeña, la energía de la pared disminuye, facilitando su movilidad. Esto evita (o por lo menos aminora) el anclaje de las paredes. Por otro lado, como cada configuración es calculada independientemente, elimina los efectos de memoria debido a configuraciones calculadas a otros valores de  $(T, \eta)$  mejorando la estadística. Como las fajas se alinean en el sentido de la magnetización en el plano, la aplicación de un campo magnético planar fuerza la dirección de las mismas. Este hecho es corroborado experimentalmente en los trabajos de Wu *et al.* [38] sobre láminas mixtas de Co/Cu/Fe/Ni/Cu. La deposición de Co genera un campo magnético en la dirección del plano al cual se alinean las fajas de la lámina de Fe/Ni y por Portmann *et al.* [93] en láminas de Fe/Cu.

En la Fig. 6.9 se muestra la variación del ancho de fajas con la temperatura para  $\eta = 7,5$ . Como los tiempos de simulación son altos, se reduce el tamaño del sistema a  $L = 80$ . Los parámetros de simulación son:  $H_x = 0,5$ ,  $r = 10^{-6}$ ,  $t_e = 10^5$  y  $t_m = 10^5$ . Los resultados se corroboran calculando algunos puntos con tamaño  $L = 120$  con  $H_x = 0,5$ ,  $r = 10^{-7}$ ,  $t_e = 10^6$  y  $t_m = 10^6$ .

La temperatura de reorientación se encuentra en  $T \approx 2$ , donde en ancho de fajas es  $h = 10$ . Bajando en temperatura se aprecia una meseta en torno a este valor hasta  $T = 1$ , en donde un crecimiento abrupto puede ser observado. A  $T = 0,4$  el ancho promedio alcanza un valor de  $h \approx 14$ , aunque se registran valores de  $h = 16$  en varias realizaciones (el ancho de fajas a temperatura cero es  $h = 17$ ). Dentro de los errores de la simulación los resultados obtenidos para ambos tamaños de sistema son iguales.

El comportamiento peculiar del ancho de faja con la temperatura puede ser contrastado con el comportamiento de la magnetización en el plano. En la Fig. 6.10 se grafica la magnetización en el plano en función de la temperatura. Si bien es muy difícil eliminar el ruido, a temperaturas cercanas a  $T = 2$  la curva presenta una anomalía que está relacionada con la reorientación. A temperaturas en el rango  $T = (1; 2)$  se aprecia variación suave de la magnetización hasta que ésta experimenta un “crossover” a  $T \approx 1$ . El punto de inflexión coincide con el fin de la meseta en la Fig. 6.9. Esto muestra a las claras una fuerte correlación entre la magnetización en el plano y el ancho de las fajas. Asumiendo que la disminución de la temperatura es equivalente a un aumento en la

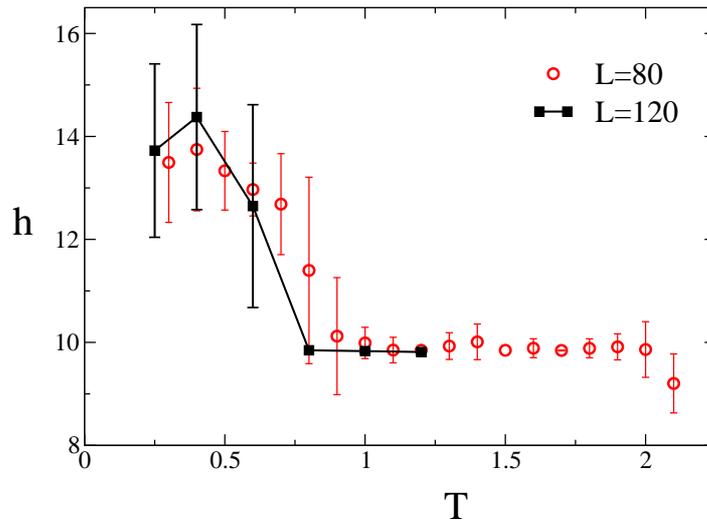


Figura 6.9: Dependencia del ancho de fajas con la temperatura para  $\eta = 7,5$  simulado mediante termalización con campo magnético. La curva roja se simula sobre una red de tamaño  $L = 80$  con  $H_x = 0,5$ ,  $r = 10^{-6}$ ,  $t_e = 10^5$  y  $t_m = 10^5$ . La curva negra representa tres puntos que han sido simulados sobre un sistema de tamaño  $L = 120$  con  $H_x = 0,5$ ,  $r = 10^{-7}$ ,  $t_e = 10^6$  y  $t_m = 10^6$ . Las barras de error se extraen de promediar sobre diferentes realizaciones.

anisotropía, el cambio en el comportamiento del ancho de fajas y de la magnetización en el plano puede estar relacionada con lo mencionado en el Cap. 6.2, basado en las argumentaciones de Won *et al.* [45]. Este punto podría ser un “crossover” entre un comportamiento de bajas temperaturas dominado por la anisotropía uniaxial y un comportamiento de altas temperaturas dominado por la interacción dipolar. Como gran parte de los espines que contribuyen con la magnetización en el plano son los que se encuentran en la pared, este resultado corrobora o visto en el Cap. 5 a temperatura cero, en donde se ve una estrecha relación entre el comportamiento de las paredes y el ancho de fajas.

### 6.4.2. Variación del ancho de fajas con la anisotropía

Hemos observado como las simulaciones con protocolo escalera en la temperatura, para los tiempos de equilibración utilizados, no muestran variación del ancho de faja. La situación se revierte al cambiar el parámetro de la simulación a  $\eta$ , siempre a campo magnético cero. Una corrida realizada con protocolo escalera en  $\eta$  sobre un sistema con  $L = 144$ ,  $t_e = 3 \times 10^3$ ,  $t_m = 3 \times 10^3$  muestra claramente la variación del ancho de fajas con la anisotropía. Sin embargo, los resultados más interesantes surgen de utilizar el protocolo VPTC ya que tiene la propiedad de proveer información relacionada con la dinámica del sistema. Este algoritmo es de gran utilidad a la hora de interpretar los mecanismos involucrados en la variación del ancho de fajas. En la Fig. 6.11 se puede apreciar una secuencia de configuraciones de  $S^z$  tomadas de un VPTC para un sistema de tamaño  $L = 120$ , temperatura  $T = 0,5$  y tasa  $r = 10^{-6}$  con condición inicial ferromagnética en el plano a baja anisotropía ( $\eta = 4$ ). Sobre la reorientación ( $\eta = 6,65$ ), el sistema alcanza una fase de fajas  $h \approx 8$  con dos dislocaciones. En la configuración  $\eta = 6,85$  la dislocación inferior de espines up se aniquila con una faja y genera otra de espines down debido a las fluctuaciones térmicas (ver

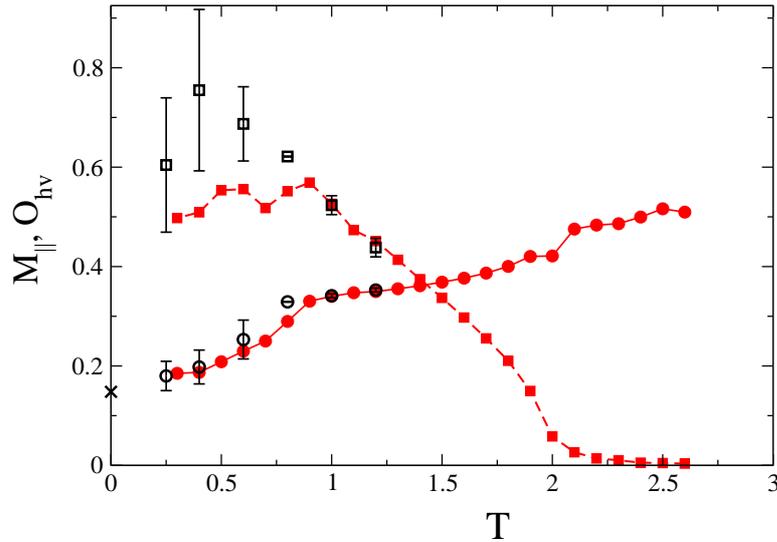


Figura 6.10: Magnetización en el plano (círculos) y parámetro de orden de fajas (cuadrados) en función de la temperatura para  $\eta = 7,5$  obtenido con el protocolo de termalización con campo magnético. Los puntos llenos son simulados sobre una red de tamaño  $L = 80$  con  $H_x = 0,5$ ,  $r = 10^{-6}$ ,  $t_e = 10^5$  y  $t_m = 10^5$ . Los puntos abiertos son simulados sobre un sistema de tamaño  $L = 120$  con  $H_x = 0,5$ ,  $r = 10^{-7}$ ,  $t_e = 10^6$  y  $t_m = 10^6$ . Las líneas son una guía para el ojo. Con una cruz se marca el valor obtenido mediante MC a temperatura cero (ver Cap. 5).

abajo a la izquierda y arriba a la izquierda). Mientras tanto, la dislocación central comienza a moverse hacia el borde de la red. Como las condiciones de contorno son periódicas, las dislocaciones no pueden aniquilarse en el borde de la muestra como en los sistemas reales, sino que continúan su movimiento pasando a la pared opuesta. Con condiciones periódicas, el único mecanismo por el cual se pueden eliminar una dislocación es por aniquilación. En la simulación presentada esto no ocurre ya que las dislocaciones se encuentran a anisotropía muy alta ( $\eta = 7,5$ ). En esta instancia las paredes se han vuelto muy delgadas y de alto costo energético por lo que habría que esperar un tiempo muy largo para observar la aniquilación. La dinámica de las dislocaciones da como resultado un mayor ancho de fajas. El ancho de fajas pasa de  $h = 8,6$  sobre la reorientación a  $h = 12$  a  $\eta = 7,5$ . También se puede observar como las fluctuaciones térmicas disminuyen al aumentar la anisotropía, algo similar a lo que ocurre cuando disminuimos la temperatura.

En todas las simulaciones realizadas, barriendo varias temperaturas y probando tasas de VPTC que van entre los valores  $r = [10^{-4}, 10^{-7}]$ , se observa que el movimiento de las dislocaciones se produce exclusivamente en la fase canted, no hay movilidad de dislocaciones en la fase *Ising*. Cabe la pregunta de si es posible observar movimiento de dislocaciones en la fase *Ising* para termalizaciones mayores y si, en caso de conseguir equilibrar un sistema en esa región, es posible ver variación del ancho de fajas con la anisotropía. Las simulaciones que realizamos no son suficientes para encontrar una respuesta a estos interrogantes y más cálculos deben ser llevados a cabo.

Cabe a esta altura preguntarse si la dinámica de las dislocaciones es el único medio a través del cual se modifica el ancho de las fajas con la anisotropía. En este sentido se exponen dos realizaciones de un VPTC sobre un sistema de tamaño  $L = 120$ , a temperatura  $T = 0,1$  y tasa  $r = 10^{-7}$  con condición inicial ferromagnética en el plano a  $\eta = 4$ , ver Fig. 6.12. Para ambos se calcula el ancho de faja de acuerdo a la Ec. (6.5). En la gráfica superior, el sistema alcanza un estado de fajas sin

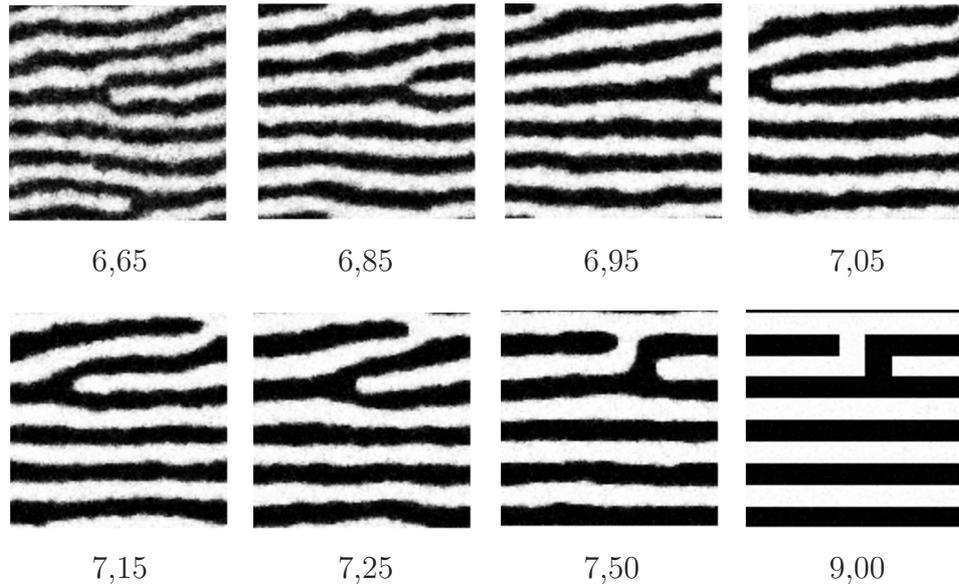


Figura 6.11: Dinámica de dislocaciones en función de la anisotropía. Se grafica la componente  $S^z$  en escala de grises de un sistema  $L = 120$ ,  $\delta = 6$ ,  $T = 0,5$  en función de la anisotropía (valor asignado a cada figura). La simulación se lleva a cabo mediante un VPTC en  $\eta$  con tasa  $r = 10^{-6}$  y con condición inicial ferromagnética en el plano a  $\eta = 4$ .

dislocaciones sobre la reorientación. Este ancho de fajas permanece invariante dentro de las escalas de tiempo accesibles a la simulación ya que el sistema es incapaz de escapar de la metaestabilidad. En la gráfica inferior, la configuración alcanzada sobre la reorientación presenta un ancho de fajas muy similar al anterior pero con dislocaciones. Al aumentar la anisotropía, las dislocaciones se mueven hasta aniquilarse, hecho que ocurre en  $\eta \approx 6,8$ . Todas las simulaciones realizadas con VPTC muestran variación del ancho de fajas siempre y cuando existan dislocaciones. Una vez que éstas se aniquilan, el ancho de fajas permanece invariante por el resto de la simulación. El estado en el cual el sistema queda atrapado tiene que ser un estado de fajas, sin importar si son fajas puras o híbridas como las descritas en el Cap. 3. Cotejando los resultados para varios parámetros de simulación y varias temperaturas, se puede ver que existe una ventana de valores para la tasa de cambio  $r$  en la cual el ancho de fajas varía. Por debajo de ese valor, el sistema es una sopa de defectos con muchas dislocaciones que no tienen el tiempo suficiente para moverse. Por encima, el sistema aniquila todas sus dislocaciones cerca de la reorientación quedando atrapado en un estado metaestable el resto de la corrida. Esta ventana debería variar con el tamaño del sistema y con  $\delta$  porque cuantas más dislocaciones posee el sistema, menor es la probabilidad de eliminarlas a todas. En los rangos de temperatura usados, la tasa  $r = 10^{-5}$  presenta los mejores resultados. Otra prueba realizada consiste en un VPTC en sentido inverso, de la región *Ising* a reorientación partiendo de estados de faja ordenados y barriendo un amplio rango de temperaturas. En ninguno de estos casos se produce variación del ancho de fajas, sólo se produce curvatura de las paredes debido a efectos térmicos.

En vista a estos resultados, podemos apreciar que al aumentar la anisotropía el ancho de fajas de equilibrio aumenta generando tensión sobre el sistema, que busca un ancho de fajas más grande para satisfacer el mínimo de la energía libre. Como la red genera anclaje de dominios, el crecimiento de las fajas no se puede dar por ensanchamiento progresivo. Por lo tanto, el único mecanismo

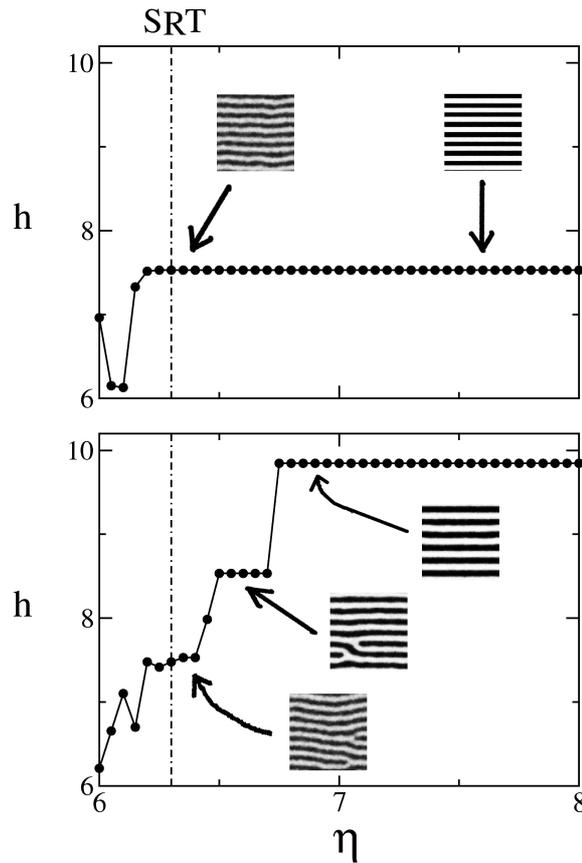


Figura 6.12: Correlación entre el ancho de fajas y la posición de las dislocaciones a medida que se varía la anisotropía en un sistema  $L = 120$ ,  $T = 0,1$  y  $r = 10^{-7}$  simulado con VPTC con condición inicial ferromagnética en el plano a  $\eta = 4$  para dos realizaciones diferentes. Las flechas indican el lugar en donde es tomada la imagen, la escala de grises y los ejes de coordenadas respetan la convención establecida.

posible para el aumento del ancho de fajas es la dinámica de dislocaciones. Este fenómeno se observa tanto en las láminas ferromagnéticas ultradelgadas [21], como en garnets ferrimagnéticos [7, 94] o rollos convectivos [95]. Si bien los experimentos citados trabajan variando la temperatura, la fenomenología es la misma. La disminución de la temperatura en los experimentos, equivalente a un aumento en la anisotropía, genera la nucleación de dislocaciones que viajan por la muestra hasta aniquilarse en los bordes o entre si. En nuestro modelo, el sistema no tiene bordes por lo entonces la única aniquilación posible es entre dislocaciones. El movimiento de las dislocaciones se genera por la tensión sobre las paredes adyacentes a la dislocación [7]. Es razonable pensar que aparece una fuerza sobre la dislocación que trata de reducir la longitud de la pared. Hasta donde alcanza nuestro conocimiento, esta es la primera evidencia numérica, obtenida mediante dinámica de Monte Carlo, de la dinámica de dislocaciones como mecanismo para la variación del ancho de fajas.

Las simulaciones con protocolo VPTC son sumamente útiles a la hora de conocer la dinámica de dislocaciones y de como el sistema alcanza, en función de la anisotropía, estados de fajas más anchas. La aniquilación de las dislocaciones genera estados metaestables de fajas de los cuales

el sistema no puede salir. Son necesarios, entonces, sistemas más grandes que alberguen más dislocaciones para evitar caer en metaestabilidades y obtener curvas confiables de la variación del ancho de faja con la temperatura. A su vez, estas simulaciones deberían ser realizadas a muy baja tasa de cambio para darle tiempo al sistema de acomodar sus dominios. Estas mejoras en las simulaciones no son factibles de implementar de momento.

Aplicamos ahora el protocolo de termalización con campo magnético para obtener el ancho de fajas en función de la anisotropía y comparar los resultados de este método con los obtenidos por medio del VPTC. En la Fig. 6.13 se muestra el comportamiento del ancho de fajas con la anisotropía para temperatura  $T = 0,5$  obtenido con tres campos de saturación  $H_x = 0,5; 0,5; 1$  con  $r = 10^{-5}$ ,  $t_e = 10^5$  y  $t_m = 10^4$ . También se agregan los resultados de la sección anterior para un VPTC en  $\eta$  a tasa  $r = 10^{-5}$  para comparar. Sobre la reorientación, el ancho de fajas alcanzado es  $h \approx 7$  en todas las corridas, en consonancia con el valor esperado a temperatura cero. Esto es de esperar debido a que en esta zona las paredes de dominio son fáciles de mover y, por lo tanto, de termalizar. Las diferencias entre los parámetros se observan a anisotropías altas. Para  $\eta = 7,8$  el campo  $H_x = 0,2$  arroja mejores resultados. Este valor de anisotropía se encuentra, dentro de los errores de las simulaciones, sobre la transición entre la fase canted y la *Ising*. El ancho de faja en este punto es igual al ancho de fajas correspondiente a temperatura cero. Esto va acorde a la hipótesis de que la variación del ancho de las fajas es un efecto dinámico que no es posible ver en la fase *Ising*. En  $\eta = 7,8$  las curvas termalizadas con campo presenta un máximo. Esto se debe a que, por encima de este valor, el sistema no logra ser termalizado y queda atrapado en estados metaestables con dominios más pequeños. Por encima de  $\eta = 7,8$ , el anclaje es muy fuerte y son necesarios campos magnéticos mayores para mover las paredes, esto determina que los mejores resultados se obtengan con  $H_x = 1$ .

El VPTC en anisotropía, dentro de los errores de la simulación, tiene valores similares a las curvas termalizadas con campo cerca de la reorientación. Como mencionamos, cerca de la reorientación, las paredes son fáciles de mover, por lo que la dinámica de las dislocaciones es fluida y permite seguir con fidelidad la variación del ancho de fajas con la anisotropía. Para anisotropías más altas, la paredes comienzan a sufrir el anclaje de la red y los anchos observados son inferiores a los obtenidos mediante termalización con campo. Este argumento explica por qué no observamos variación del ancho de fajas con la temperatura en los protocolos escalera. Si se realiza la simulación en temperatura a valores altos de la anisotropía ( $\eta > 6,8$ ), las dislocaciones están ancladas por lo que el ancho de fajas no puede aumentar. En la región de ( $\eta < 6,8$ ) el anclaje es débil, sin embargo el ancho de fajas que se alcanza sobre la reorientación es muy similar al correspondiente a temperatura cero, por lo que la tensión presente en el sistema para mover las dislocaciones es muy pequeña.

### 6.4.3. Simulación de láminas con espesor $d$ variable

Mediante el uso de la hipótesis fenomenológica  $\eta \sim 1/d$  propuesta en la Sec. 6.3, se pueden graficar los resultados correspondientes a la Fig. 6.13 en un gráfico  $h$  vs.  $\sim d$ . Éste se expone en la Fig. 6.14 para el caso correspondiente a la termalización con campo  $H_x = 0,2$ . Si bien no se extienden sobre un rango lo suficientemente amplio como para discernir entre un decaimiento exponencial [38, 45] o una ley de potencia [47], muestra que el modelo es capaz de reproducir el comportamiento cualitativo correspondiente a aumentar el espesor de la lámina. Hay que aclarar que en esta hipótesis no se considera el efecto del aumento del número promedio de vecinos debido al aumento del espesor, lo que produciría anchos de faja más grandes debido al incremento de la

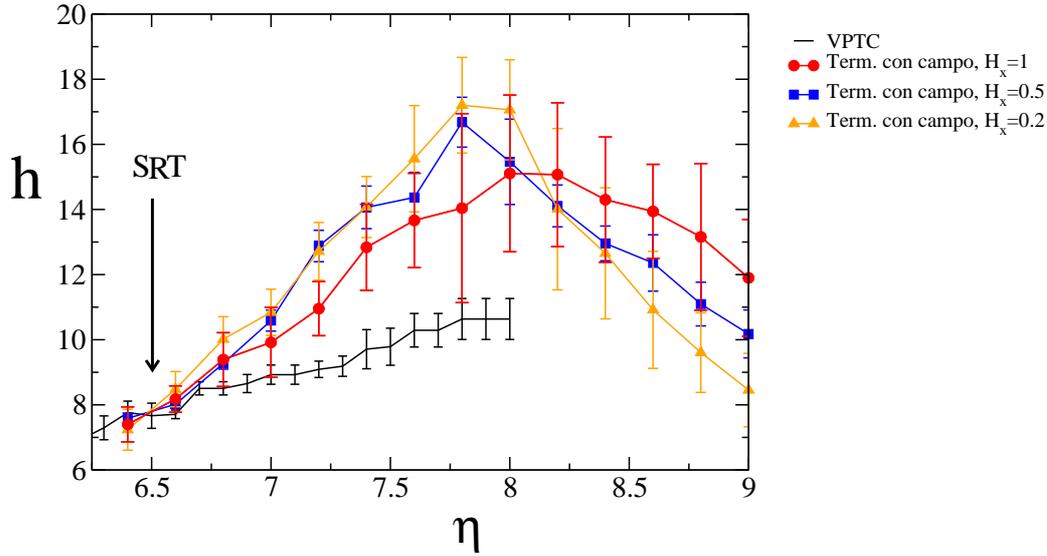


Figura 6.13: Variación del ancho de fajas con  $\eta$  simulado mediante termalización con campo magnético sobre una red  $L = 144$  para distintos campos magnéticos iniciales,  $H_x = 0,2; 0,5; 1$  con  $r = 10^{-5}$ ,  $t_e = 10^5$  y  $t_m = 10^4$ . Los puntos representan el promedio sobre varias realizaciones, las barras de error corresponden a la desviación cuadrática media. Se agrega a modo de comparación los resultados obtenidos mediante la aplicación de un VPTC en  $\eta$  con tasa  $r = 10^{-5}$ .

contribución de intercambio.

Otra aplicación de esta hipótesis consiste en la simulación de láminas de espesor variable, muy utilizadas en los trabajos experimentales. Estas muestras presentan grandes facilidades a la hora de medir y son ampliamente utilizadas en los trabajos experimentales. En particular, resultan de gran utilidad para estudiar las propiedades de la láminas en función del espesor. Haciendo uso de este hecho, simulamos cuñas con nuestro modelo monocapa. Se elige el eje  $x$  como eje de crecimiento del espesor (disminución de la anisotropía). Para visualizar mejor los patrones se generaliza el sistema cuadrado a uno rectangular de dimensiones  $L_x \times L_y$ . Como no encontramos una forma de bajo costo computacional para evitar los efectos de borde en estas muestras, utilizamos condiciones de contorno periódicas. Por lo tanto, el eje  $x$  presenta un salto en el valor de  $\eta$ . Inspeccionando visualmente las configuraciones obtenidas, no se observa alteración en los dominios que están a una distancia de 10 parámetros de red de los bordes. El protocolo de simulación utilizado es el de termalización con campo magnético en el plano aplicado en la dirección  $x$ .

La configuración de espines se puede observar discriminada por componente en escala de grises en la Fig. 6.15 para dos sistemas de dimensiones  $L_x = 360$ ,  $L_y = 180$  a temperatura  $T = 1,0$ . Los parámetros de termalización son:  $r = 10^{-5}$ ,  $t_e = 10^5$ . En (a) se asume un crecimiento lineal del espesor, éste es de la forma  $d = ax + b$  con  $d^{-1}(1) = 6$  y  $d^{-1}(360) = 9$ . Para valores de  $x$  grandes, la lámina es gruesa, la interacción dipolar domina la muestra y los espines se ordenan ferromagnéticamente en el plano, esto se aprecia en el color blanco de la componente  $S^x$ . Es evidente el lugar donde se produce la reorientación, que puede distinguirse tanto en la componente perpendicular del espín como en las paredes que se ven en la componente  $S^x$ . El valor de la anisotropía sobre la reorientación es  $\eta = 6,75$ , en coincidencia con el diagrama de fases. Sobre las regiones más del-

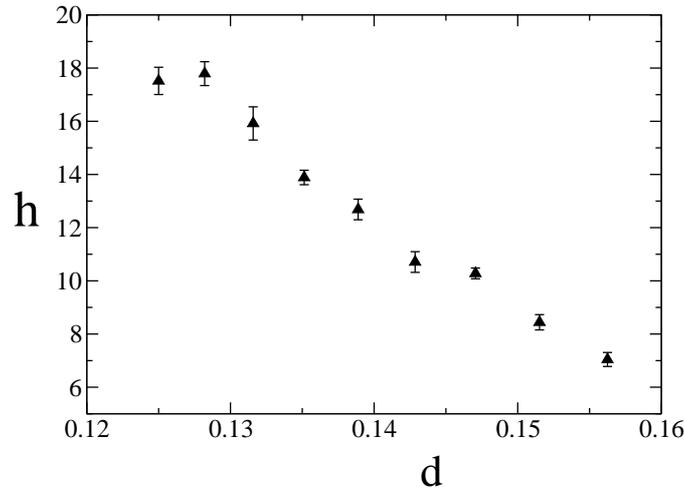


Figura 6.14: Dependencia del ancho de faja con el espesor de la lámina calculado por medio de la hipótesis fenomenológica  $d \sim 1/\eta$ . Los resultados corresponden a una simulación a tamaño  $L = 144$  termalizada con campo  $H_x = 0,2$  con  $r = 10^{-5}$ ,  $t_e = 10^5$  y  $t_m = 10^4$ .

gadas de la lámina se observan múltiples dislocaciones que tienen como consecuencia el aumento del ancho de fajas. Este tipo de patrones es común en las cuñas experimentales [38, 42] y se le ha dado el nombre de “fingering” o “branching” por obvias razones. Un ojo perspicaz podría observar diferencias en los anchos de pared entre la región delgada y la reorientación y de como las paredes de los dominios son más estables a espesores delgados. Al igual que en el caso de láminas con anisotropía constante, se observa curvatura de las paredes. En **(b)** se simula una cuña compuesta por tres escalones tal como se muestra en la figura. Sobre la línea  $\eta = 6 - 7$  irrumpen las fajas que sufren algunas dislocaciones hasta alcanzar  $\eta = 8$ . A esto valores de anisotropía se observan metaestabilidades debido a que son necesarios más pasos de Monte Carlo para termalizar. Notar el corte abrupto en la transición de reorientación, hecho que se asemeja a las primeras imágenes de cuñas [5]. Esto es un indicio de que en las primeras experiencias con cuñas el control del espesor no estaba tan desarrollado como en la actualidad. En **(c)** se exhibe el ancho de fajas en función de la anisotropía para una cuña simulada con los mismos parámetros pero sobre una red de tamaño  $L_x = 400$  y  $L_y = 160$ . El ancho de fajas se calcula mediante la Ec. (6.5) aplicado sobre los  $L_y$  sitios correspondientes a cada valor de  $x$  o, equivalentemente,  $\eta$ . Para la gráfica se toma 1 de cada 10 puntos.

En estas imágenes se aprecia la estrecha relación existente entre el espesor de la lámina y la temperatura. En láminas de alta anisotropía que no presentan reorientación, algunos grupos experimentales trabajan con una temperatura efectiva. Ésta se define de la forma:  $\tau = (T - T_c(d))/T_c(d)$  [21]. Según esta definición la temperatura efectiva se puede modificar de dos formas: variando la temperatura del experimento o variando el espesor de la lámina. El uso de la temperatura efectiva en lugar de la temperatura real, trae grandes ventajas a la hora de medir ya que cambiar la temperatura de medición es equivalente a desplazar el detector un par de micrómetros sobre una cuña. En este trabajo, la región de anisotropías altas que no presentan reorientación son difíciles de simular. Sin embargo, en nuestro modelo esta propiedad es observada reemplazando la temperatura de Curie  $T_c(d)$  por la temperatura de reorientación  $T_{SRT}(d)$ .

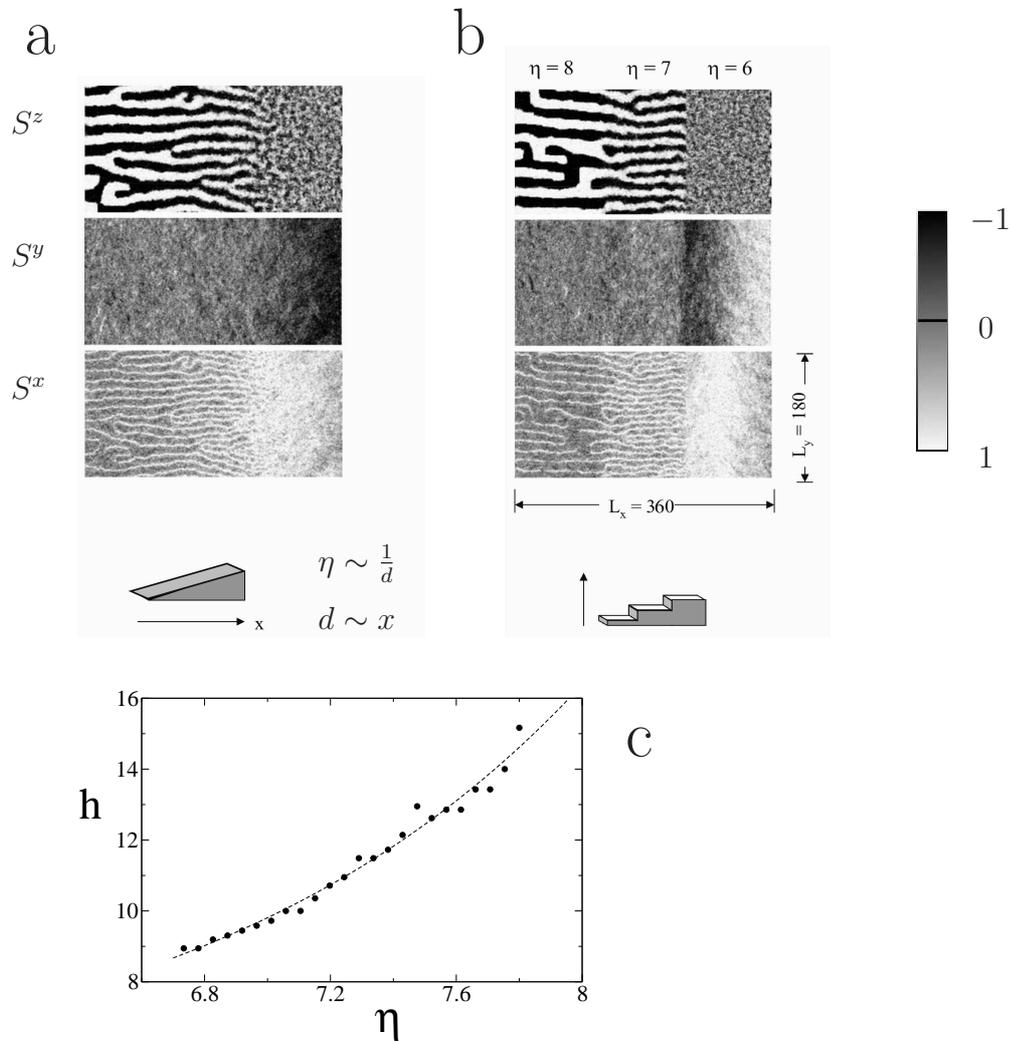


Figura 6.15: Configuración de fajas en cuñas a temperatura  $T = 1$  con  $r = 10^{-5}$ ,  $t_e = 10^5$  y  $H_x = 0,5$ . **(a)** cuña de crecimiento lineal,  $\eta(x = 1) = 6$  y  $\eta(x = 360) = 9$ . **(b)** cuña con tres escalones. **(c)** ancho de faja en función de  $\eta$  en una cuña de crecimiento lineal con los mismos parámetros de simulación para un sistema de tamaño  $L_x = 400$  y  $L_y = 160$ . En línea de trazos: ajuste de una ley de potencia sobre los puntos graficados con el cual se estima la posición de las transiciones entre fajas en el diagrama de fases de Fig. 6.16.

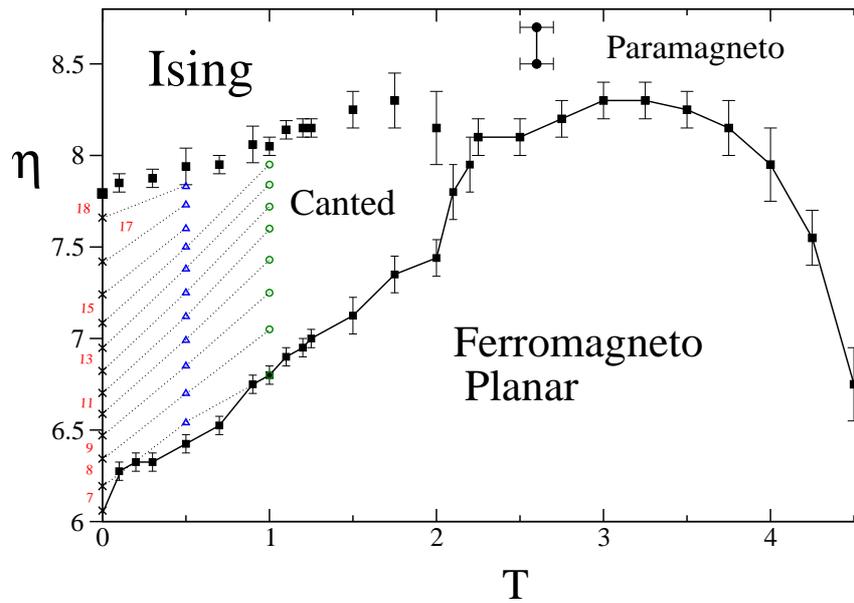


Figura 6.16: Variación del ancho de fajas en el diagrama de fases  $(T, \eta)$  para  $\delta = 6$ . ( $\times$ ) transiciones entre fajas obtenidas de la minimización de la energía; ( $\Delta$ ) transición aproximada entre fajas de acuerdo a un ajuste realizado sobre la curva  $H_x = 0,2$  de Fig. 6.13; ( $\circ$ ) transición aproximada entre fajas según un ajuste obtenido para una cuña simulada sobre una red  $L_x = 400$ ,  $L_y = 160$  a temperatura  $T = 1$  con parámetros de simulación:  $H_x = 0,5$ ,  $r = 10^{-5}$ ,  $t_e = 10^5$  (ver Fig. 6.15).

Hemos visto para varios algoritmos como el ancho de fajas varía según la temperatura o la anisotropía. Cabe preguntarse ahora cuál es el comportamiento de las líneas de transición entre distintos anchos de fajas en el diagrama de fases  $(T, \eta)$ . Debido a las dificultades de las simulaciones, no podemos dar una respuesta definitiva a esta pregunta, pero si podemos usar los resultados expuestos para arrojar algo de luz sobre el problema.

Del ajuste de la Fig. 6.15 C se obtienen los valores de anisotropía a los cuales se producen las transiciones entre fajas de distinto espesor a temperatura  $T = 1$ . Por otro lado, ajustando la curva correspondiente a  $H_x = 0,2$  en la Fig. 6.13 con una ley de potencia, se puede calcular la posición aproximada de las transiciones entre distintos anchos de faja a temperatura  $T = 0,5$ . Con esto más la información disponible del cálculo a temperatura cero, graficamos las líneas de transición entre fajas de distinto ancho de manera aproximada (ver Fig. 6.16). Estos resultados dan una idea de como es el aspecto de las líneas de transición entre estados de fajas canted en el diagrama de fases a  $\delta = 6$ .

#### 6.4.4. Paredes, dislocaciones y vórtices

Nos proponemos en esta sección analizar con más detenimiento el comportamiento de los dominios magnéticos. Una primera pregunta a responder es qué tipo de paredes se generan entre los dominios. Un análisis exhaustivo de diferentes configuraciones para distintos puntos del diagrama de fases muestra que, en las transiciones de fajas, las paredes son de *Bloch*. Este resultado concuerda con los cálculos analíticos a temperatura cero [51, 56], con los resultados del Cap. 5 y con los trabajos experimentales en donde se observa que las fajas se alinean a lo largo del campo

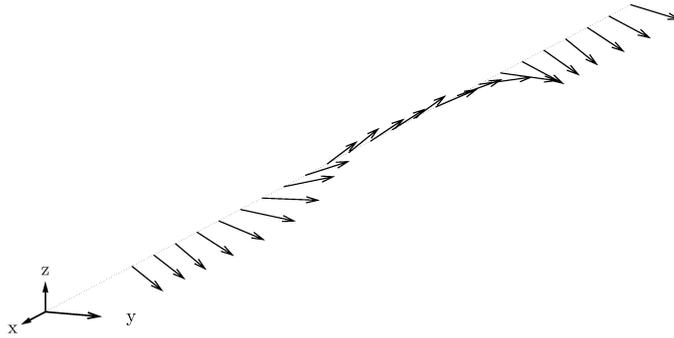


Figura 6.17: Rotación de los espines de la pared entre dos fajas en un sistema  $L = 120$ ,  $\eta = 6,5$  simulado con un protocolo escalera con termalización por punto  $t_e = 2 \times 10^3$  con  $\Delta T = 0,1$ .

magnético [38]. En la Fig. 6.17 se han graficado los espines de una pared típica. Ésta en particular se extrae de una simulación con protocolo escalera con  $L = 120$  con  $\eta = 6,5$  termalizado durante  $t_e = 2 \times 10^3$  con  $\Delta T = 0,1$ . Este tipo de pared contribuye a la magnetización en el plano y es la responsable de que las fajas queden alineadas a lo largo del campo externo cuando éste se aplica en el plano.

A temperatura cero y cerca de la reorientación, las paredes son anchas y presentan un perfil sinusoidal (ver Cap. 5). Debido al gran número de espines de la pared, éstas contribuyen en gran medida a la magnetización neta en el plano. A bajas temperaturas y alta anisotropía la pared se vuelve abrupta, siendo de ancho  $w = 1$  en el límite *Ising*. Al igual que lo realizado a temperatura cero, analizamos los perfiles de magnetización para algunas de las muestras utilizadas en el cálculo de la curva  $H_x = 0,5$  de la Fig. 6.13. Cada perfil es el resultado del promedio sobre aproximadamente 25 perfiles tomados a lo largo de la dirección de la faja. Debido a la presencia de fluctuaciones térmicas como dislocaciones o curvatura de pared los promedios se llevan a cabo sobre porciones relativamente pequeñas del sistema. Como el campo de termalización se aplica en la dirección  $x$ , las fajas se alinean en esa dirección, con lo cual el perfil de magnetización de fajas se debe graficar en la dirección  $y$ .

Los perfiles promedio se pueden apreciar en la Fig. 6.18 junto con la desviación estándar asignada a cada sitio. Para altas anisotropías las fajas son anchas con perfil cuadrado y paredes abruptas tipo *Ising* y los espines están perpendiculares. A medida que  $\eta$  disminuye, el ancho de faja disminuye y las paredes se tornan más anchas, igual a lo observado a temperatura cero (ver Cap. 5). El perfil se suaviza hasta alcanzar la forma sinusoidal sobre la reorientación. El caso  $\eta = 6,45$  se encuentra sobre la reorientación, las grandes barras de error se deben al ruido térmico. Este comportamiento es similar al observado en los perfiles de campo medio aplicado al modelo de *Ising* dipolar [65] al variar la temperatura, aún cuando en dicho límite no existe reorientación. De todas formas, se debe recordar que la naturaleza de las paredes que aquí se representan es distinta a las paredes *Ising* con campo medio. En campo medio la pared se forma debido a la deslocalización del espín mientras que en estas simulaciones la pared es de *Bloch*. Es interesante comparar nuestros resultados con los perfiles de magnetización experimentales del citado trabajo medidos sobre una lámina de Fe/Cu de 1 – 2ML a temperaturas  $T = 10\text{K}$  y  $T = 330\text{K}$  (ver Fig. 6.19). Como se puede apreciar el comportamiento es cualitativamente el mismo dentro de los errores experimentales.

Hemos descrito el comportamiento de los espines en las paredes correspondientes a dominios

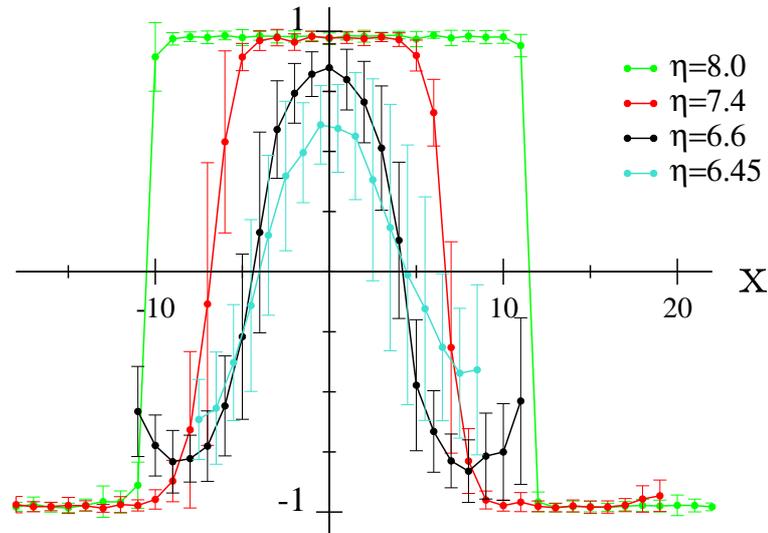


Figura 6.18: Perfiles de magnetización  $\langle S^z \rangle$  a temperatura  $T = 0,5$  para las anisotropías indicadas. Cada perfil es el resultado del promedio sobre aproximadamente 25 perfiles tomados a lo largo de la dirección de la faja. Las configuraciones usadas son las mismas que se utilizaron en la curva  $H_x = 0,5$  de Fig. 6.13.

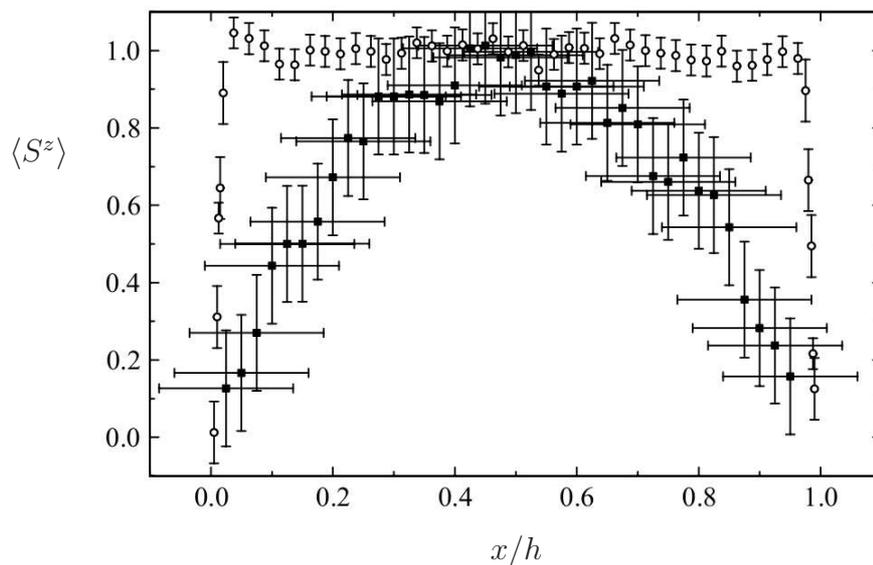


Figura 6.19: Perfiles de magnetización para una lámina de Fe/Cu de 1 – 2ML a temperaturas  $T = 10\text{K}$  (círculos abiertos) y  $T = 330\text{K}$  (cuadrados cerrados) obtenidos de promediar sobre pequeñas porciones de la lámina (ver Ref. [65] para más detalles). Ambas curvas están reescaladas y los ejes poseen unidades arbitrarias.

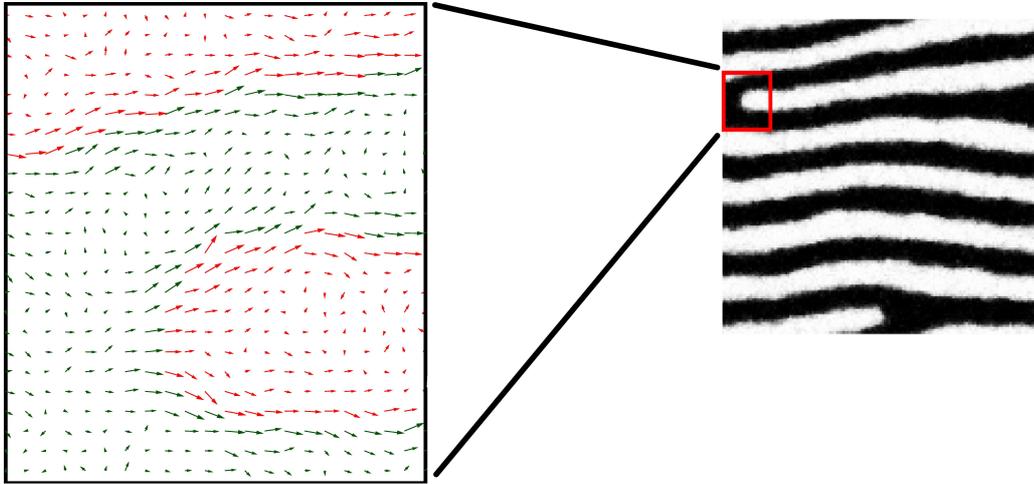


Figura 6.20: Configuración de espines de un sistema simulado con VPTC para una red de tamaño  $L = 144$  con parámetros de simulación  $\delta = 7$ ,  $\eta = 7,5$ ,  $T = 0,5$ ,  $r = 10^{-5}$ . En escala de grises la componente perpendicular y en el diagrama de flechas la ampliación de las componentes de espín en el plano. Las flechas rojas indican que la componente  $S^z$  es negativa y las verdes positiva.

de fajas. Los espines en las dislocaciones, en cambio, forman una pared de Néel. Esto se puede ver en la Fig. 6.20. Esto es razonable si consideramos las energías intervinientes. Por un lado, el hecho de que una pared de *Néel* sea más costosa que una pared de *Bloch* está dada por las contribuciones de largo alcance de energía dipolar [56]. Considerando que estamos en la fase canted, los dominios tienen una componente de magnetización en el plano. Tanto la componente planar de los dominios como la componente planar de las paredes entre fajas están en la misma dirección. En las dislocaciones la situación es distinta: si la pared fuera de *Bloch*, la componente planar de los espines de la pared estaría orientada perpendicularmente a la componente planar del dominio. Esta situación generaría un aporte significativo de energía de intercambio entre los espines de la pared y los del dominio ya que habría una pared de 90 grados en la componente planar. Dado que la interacción de intercambio es varios órdenes de magnitud mayor que la interacción dipolar, una pared de *Bloch* no es favorable. Por lo tanto, los espines que forman la dislocación poseen componente planar en el mismo sentido que la componente planar de los espines del dominio. Queda formada así, una pared de *Néel*.

Se sabe que esta clase de sistema presenta una fase de burbujas al aplicar un campo magnético perpendicular [7, 54, 55] y que este estado es metaestable al quitar el campo por completo. En algunos trabajos esta geometría se ve sin la necesidad de aplicar campos magnéticos [42]. A lo largo de este trabajo, utilizamos campos magnéticos para equilibrar las muestras. Si bien no hemos estudiado el comportamiento del sistema en la presencia de campos magnéticos, es posible observar defectos topológicos circulares en las simulaciones. Este tipo de fenómeno se observa en sistemas que no están adecuadamente termalizados. Una característica interesante de este modelo es que permite discernir el comportamiento de las paredes en los bordes de las burbujas. En la

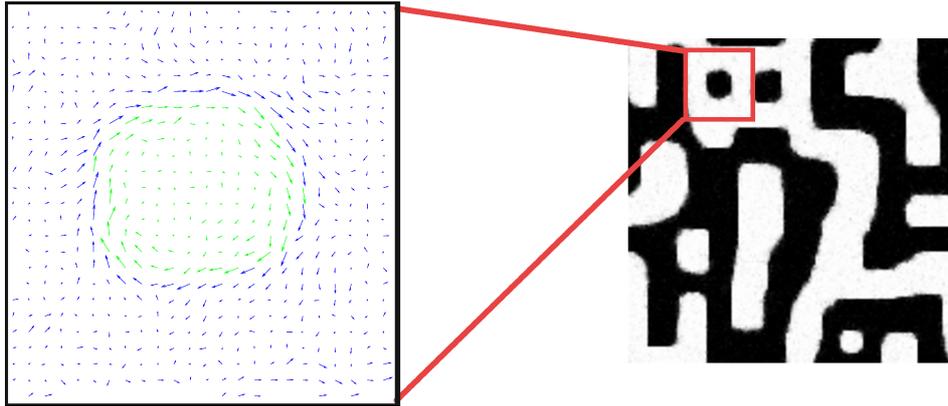


Figura 6.21: Configuración de espines correspondiente a un vórtice. El sistema es de tamaño  $L = 144$  y los parámetros de simulación son:  $\eta = 7,2$ ,  $T = 0,5$ , termalizado con campo  $H_x = 0,5$ . En escala de grises la componente perpendicular y en el diagrama de flechas la ampliación de las componentes de espín en el plano. Las flechas azules indican que la componente  $S^z$  es negativa y las verdes positiva.

Fig. 6.21 se puede apreciar este comportamiento para una simulación termalizada con campo con parámetros  $L = 144$ ,  $\eta = 7,2$ ,  $T = 0,5$ ,  $H_x = 0,5$ . Se muestra la componente  $S^z$  en escala de grises y, en el recuadro, la burbuja sobre la cual se grafica la componente en el plano de los espines. Es interesante ver que las paredes de la burbuja forman un vórtice en la componente planar. Éste es un dominio de clausura, similar a los dominios de clausura que se forman en los materiales para reducir la energía dipolar.



# Capítulo 7

## Conclusiones

En este trabajo presentamos un estudio detallado de las propiedades críticas de un modelo *Heisenberg* clásico con anisotropía uniaxial e interacción dipolar magnética. Estudios experimentales indican que este modelo es apto para el estudio de las propiedades magnéticas en láminas ferromagnéticas ultradelgadas. Analizamos las propiedades de equilibrio del sistema a través del diagrama de fases en función de los parámetros  $(\delta, \eta, T)$ ; observamos el comportamiento del ancho de fajas en función de  $T$  y  $\eta$ ; detectamos la presencia de mínimos metaestables; vimos los mecanismos microscópicos por medio de los cuales el sistema alcanza el equilibrio y proponemos un argumento fenomenológico para el modelado de cuñas y para el análisis de la dependencia del ancho de fajas con el espesor.

En primer lugar, encontramos el diagrama de fases acabado a temperatura cero para todo rango de valores  $(\delta, \eta)$ . A bajas anisotropías el sistema presenta orden ferromagnético en el plano de la lámina. Al aumentar la anisotropía el sistema experimenta una transición de reorientación en la cual la componente perpendicular de los espines forma dominios de fajas. Por encima de la reorientación y a anisotropías intermedias, el modelo exhibe magnetización planar y ancho de pared  $w \neq 1$ . Esta región puede subdividirse en dos partes. La primera recibe el nombre de canted y se caracteriza porque los espines de los dominios no están completamente perpendiculares a la lámina. Esta fase posee paredes sinusoidales cerca de la reorientación (predicho por Yafet *et al.* [51]) y paredes hiperbólicas lejos de ella. Para valores de  $\delta$  grandes esta fase subsiste en una región cercana a la reorientación y es posible que pueda ser detectada experimentalmente, al contrario de lo predicho por Politi [56]. Esta contradicción se debe a que este autor no considera paredes de perfil hiperbólico en su análisis. La segunda región, al igual que la primera, presenta magnetización neta en el plano, pero los dominios poseen magnetización de saturación perpendicular. Esta fase recibe el nombre de saturada y se caracteriza por poseer paredes hiperbólicas. Las paredes hiperbólicas resultan consistentes con la teoría micromagnética [61] para el límite de alta anisotropía. En este trabajo demostramos que su existencia no se limita a este caso. Es importante destacar que la existencia de un crossover entre un perfil sinusoidal y una fase saturada al incrementar la anisotropía es observado en láminas de Fe/Cu(100) al disminuir la temperatura [65], aún cuando el sistema mencionado no presenta transición de reorientación. A altas anisotropías se observan fajas con paredes abruptas ( $w = 1$ ) sin componente de la magnetización en el plano. Estas fajas reciben el nombre de fajas *Ising*.

El crecimiento del ancho de fajas con la anisotropía en el diagrama a temperatura cero, está íntimamente relacionado con el decrecimiento del ancho de la pared a través de la relación  $h \sim e^{\delta/2lw}$ . A su vez, el ancho de pared está determinado por la competencia entre la interacción de inter-

cambio y la anisotropía a través de la Ec. (5.26). Una vez que la anisotropía es suficientemente grande como para que el ancho de la pared alcance la distancia interatómica,  $h$  deja de crecer. De aquí surge el interrogante de si podría un mecanismo similar estar detrás del comportamiento del ancho de fajas con la temperatura. La dependencia exponencial del ancho de fajas con la anisotropía no se refleja en el comportamiento de la energía con la anisotropía. Esto indica que los estados con anchos de fajas próximos poseen energías muy similares. Esto sugiere una proliferación de estados metaestables que dificultan el estudio del sistema con temperatura finita.

Por otro lado, presentamos un estudio detallado del diagrama de fases a temperatura finita en el límite de altas anisotropías en el rango  $0 \leq \delta \leq 4,2$ . En este caso el modelo corresponde a un *Hamiltoniano* de *Ising* dipolar. Observamos la presencia de fajas de anchos  $h = 1, \dots, 7$ , en perfecto acuerdo con los resultados a temperatura cero, y comparamos los resultados obtenidos mediante dos técnicas diferentes: campo medio y Monte Carlo. Si bien la apariencia general de ambos diagramas es la misma, varias diferencias deben ser remarcadas.

La primera diferencia en ser notada es la ausencia, en la aproximación de campo medio, de las fases nemática y tetragonal. Esto se debe al hecho que ambas fases son espacialmente desordenadas, lo que implica que  $\langle S_{\vec{k}} \rangle = \hat{m}_{\vec{k}} = 0 \forall \vec{k}$ . Tanto la simetría de rotación  $\pi/2$  de la fase nemática, como la  $\pi/4$  de la fase tetragonal, sólo pueden ser caracterizadas a través de las correlaciones espaciales o, equivalentemente, del factor de estructura. Como las fluctuaciones son despreciadas en campo medio,  $\mathcal{S}(\vec{k}) = \hat{m}_{\vec{k}} \hat{m}_{-\vec{k}} = 0$  la única fase desordenada permitida es la paramagnética (ver Refs. [73, 81][Ec. (19)]). En lugar de la nemática, campo medio presenta fases híbridas, que son estados con orden espacial más desordenados que las fajas puras. Se realizan pruebas exhaustivas intentando estabilizar este tipo de soluciones en el Monte Carlo sin ningún éxito. Esto sugiere que, en el lenguaje de grupo de renormalización, las fluctuaciones son un campo relevante que torna inestables los puntos fijos correspondientes a fajas híbridas hacia los atractores nemáticos. En algún sentido se puede pensar que los estados híbridos son los más cercanos a los nemáticos cuando las fluctuaciones son eliminadas. Esto es consistente con el hecho de que las fluctuaciones, cuando son incluidas, pueden cambiar la naturaleza continua de las transiciones predichas por campo medio entre una fase desordenada de alta temperatura y una ordenada de baja temperatura. La aproximación de *Hartree* aplicada a una versión continua del *Hamiltoniano* (2.6) predice una transición de primer orden inducida por fluctuaciones para cualquier valor finito de  $\delta$  [68] pero que se debilita a medida que crece  $\delta$ . Rastelli *et al.* demostraron que la transición es continua y pertenece a la clase de universalidad del *Ising* a primeros vecinos a  $\delta = 0$  [70]. A  $\delta = 1$  el sistema presenta una línea de transición de primer orden débil [81]. Estos resultados son consistentes con la presencia de una transición de segundo orden para pequeños valores de  $\delta$  que se une a pendiente constante con una línea de primer orden en un punto tricrítico entre  $\delta = 0,85$  y  $\delta = 1$ . También hay claras evidencias que la transición es de primer orden en  $\delta = 2$  (Refs. [68, 81]) y  $\delta = 1,7; 2,5$  (Ref. [70]). El comportamiento del cumulante de cuarto orden en este trabajo para  $\delta = 2,1$  y  $\delta = 2,25$  es consistente con una transición de primer orden.

Presentamos evidencias numéricas de la existencia de la fase nemática a temperaturas intermedias entre la fase desordenada y las fases de fajas. Dentro de las limitaciones ya mencionadas, esta fase aparece en las regiones de transición entre fajas de anchos diferentes. Esto no descarta la posibilidad de encontrarla en regiones más delgadas si exploráramos tamaños de sistema más grandes.

Existen dos escenarios posibles para valores grandes de  $\delta$ : el primero consiste en una transición de primer orden directa, desde las fajas a baja temperatura a la fase tetragonal de alta temperatura; el segundo consiste en dos transiciones mediadas por una fase nemática. Ambos mecanismos están

contemplados en los trabajos teóricos de Kashuba *et al.* [58] y Abanov *et al.* [52], basados en una aproximación continua. Si bien Abanov *et al.* [52] predicen una transición de segundo orden nemática-tetragonal, el modelo es de campo medio, aplicándose las salvedades ya hechas (ver discusiones [68, 81]). Con respecto a la transición a  $T_{nem}(\delta)$  la situación es menos clara. Cannas *et al.* [81] mostraron que, para  $\delta = 2$ , el escaleo finito es consistente con una transición de primer orden, pero la energía varía continuamente en  $T_{nem}(\delta)$  en el límite termodinámico. Esto produce una saturación en el pico del calor específico, lo que se asemeja a una transición de Kosterlitz-Thouless (KT). Esto podría ser indicio de una nueva fase: la esméctica, situada entre la nemática y las fajas cuya aparición sería confirmada simulando sistemas más grandes y estaría en consonancia con los trabajos de Kashuba *et al.* [58] y Abanov *et al.* [52] ya citados. De ser este el caso, nuestro cálculo de  $T_{nem}(\delta)$  estaría sobreestimado ya que el pico del calor específico se sitúa por encima de las transiciones KT [78] por lo que la fase nemática sería más extensa. Sin embargo esto no sale de la mera especulación y simulaciones en sistemas más grandes deben ser llevadas a cabo.

Con respecto al comportamiento a bajas temperaturas, ambos métodos predicen la existencia de un número creciente de estados metaestables en función de la interacción de intercambio  $\delta$ .

Finalmente, la principal diferencia encontrada es, dentro del rango  $\delta \leq 4,2$ , la independencia con la temperatura de las líneas de transición entre fajas en el MC en contraste con los resultados obtenidos por campo medio. Vindigni *et al.* encuentran que la variación del ancho de fajas se produce únicamente en el rango de temperaturas en el que las paredes son anchas [65]. Esto sugiere la existencia de algún umbral en el valor de  $\delta$  para el cual el sistema MC pasa a un régimen de campo medio en el sentido de un “coarse-grained”.

En el régimen de anisotropías intermedias, obtenemos el diagrama de fases en el espacio  $(T, \eta)$  para los casos  $\delta = 3; 6$ . Calculamos las líneas de transición entre los estados de fajas, ferromagnético planar y paramagnético y observamos la reentrada de una fase desordenada espacialmente -la fase tetragonal. Aplicando una hipótesis fenomenológica, por la cual la anisotropía uniaxial se comporta como la inversa del espesor  $\eta \sim 1/d$ , observamos que los diagramas de fases obtenidos concuerdan cualitativamente con los diagramas experimentales correspondientes a Fe/Ni/Cu(001) (Ref. [45, Fig. 5]), Fe/Cu<sub>3</sub>Au(100) (Ref. [37, Fig. 4]) y Fe/Ni(111)(2 ML)/W(110) (Ref. [39, Fig. 3]).

Las transiciones entre las fases de fajas, ferromagnética planar y paramagnética obedecen leyes de escala. Éstas colapsan al ser graficadas en un diagrama  $(T/\delta, \eta_{ef}/\delta)$ , donde  $\eta_{ef}$  es la anisotropía efectiva del sistema. Esto nos permite extender los presentes resultados a valores arbitrarios de  $\delta$ . Aplicando la relación  $\eta \sim 1/d$  y las leyes de escala a los diagramas de fases experimentales mencionados, obtenemos un valor aproximado de la constante de intercambio para cada experimento. Estos valores se encuentran dentro de cotas establecidas por otros medios.

En el caso  $\delta = 6$  detectamos la presencia de una extensa región de fajas canted y saturadas mediando entre las fases de fajas con perfil *Ising* y la fase ferromagnética planar. Esta fase se caracteriza por poseer paredes anchas  $w \neq 1$  y componente de la magnetización en el plano no nula. Dentro de las limitaciones de nuestras simulaciones, la variación del ancho de fajas se da únicamente en esta región y puede ocurrir tanto al variar la temperatura como la anisotropía. Esto es consistente con los resultados del diagrama a temperatura cero: existe una fuerte relación entre el crecimiento de las fajas y el ancho de la pared. Si bien los anchos de fajas simulados son relativamente pequeños, el comportamiento del ancho de fajas con la temperatura es cualitativamente similar a los resultados obtenidos para láminas de Fe/Cu [50]. Tanto nuestros resultados como los citados presentan tiempos de equilibración mayores a los tiempos de simulación o medición respectivamente. Para  $\delta = 6$  no se observa variación del ancho de fajas para altas anisotropías. No obstante, cabe notar que este fenómeno también se observa a temperatura cero, con lo cual

cabría esperar un comportamiento diferente para valores mayores de  $\delta$ .

El mecanismo por el cual el sistema modifica el ancho de las fajas es la dinámica de dislocaciones. Esto está de acuerdo con trabajos previos sobre los más diversos sistemas [15]. El ancho de fajas no aumenta de espesor en forma continua porque esto implicaría una migración de todas las fajas a lo largo de la muestra. Tal comportamiento tal vez pudiera pensarse para un sistema continuo, pero no para uno que presenta anclaje debido a la existencia de una red subyacente. Lo que se observa en las simulaciones es que el sistema nuclea una dislocación y esta se mueve a lo largo de la red, permitiendo la modificación del ancho de los dominios.

Por otra parte, encontramos una clara equivalencia entre los diferentes estados accesibles del sistema en caso de aumentar la temperatura o disminuir la anisotropía, en concordancia con lo propuesto por Portmann [21]. Esto se puede ver tanto en el comportamiento del ancho de pared como de los perfiles. Según esta hipótesis, la magnitud relevante es la temperatura efectiva definida por la relación  $\tau = (T - T_c(d))/T_c(d)$  que puede ser modificada variando la temperatura real o el espesor de la lámina.

Al igual que lo visto en el límite de alta anisotropía, observamos la presencia de gran cantidad de estados metaestables en donde el sistema queda atrapado. Esto se condice con las propiedades observadas a temperatura cero, donde las energías de estados de fajas con anchos próximos son muy similares. Al igual que las predicciones de campo medio en el límite de altas anisotropías, observamos estabilidad en estados de fajas híbridas en contraposición a los resultados de Monte Carlo aplicados al modelo de *Ising* dipolar. Esto podría ser un efecto de la presencia de una pared ancha en las fajas.

Implementando la hipótesis fenomenológica para la anisotropía y el espesor, simulamos láminas de espesor variable. Un primer caso corresponde al de la variación constante del espesor en función de una de las coordenadas. Los resultados observados tienen una gran semejanza con las imágenes extraídas de los experimentos. A medida que el espesor aumenta encontramos un estado de fajas anchas que disminuye de espesor mediante la inserción de pares de dislocación. Esto continúa hasta llegar a la reorientación, que se produce entre una faja de ancho finito y la fase ferromagnética planar. El segundo caso está constituido por tres escalones en donde el espesor varía de manera abrupta. Lo que se puede observar es la nucleación de pares de dislocación sobre las interfaces de distinto espesor. Lo que sugiere que el anclaje de las dislocaciones y en consecuencia el de las fajas, se produce sobre los defectos del material. Esto encuentra un fuerte acuerdo con los resultados experimentales.

# Apéndice A

## Cálculo de $\hat{J}(\vec{k})$ , Ec. (3.14)

En este Apéndice calculamos el espectro de  $\hat{J}(\vec{k})$  para los casos particulares de configuraciones de fajas  $\hat{J}(k_x, 0)$  y antiferromagnética  $\hat{J}(\pi, \pi)$ . De la Ec. (3.14) tenemos para el caso de fajas verticales que:

$$\hat{J}(k_x, 0) = 2 \delta(\cos k_x + 1) - S(k_x, 0) \quad (\text{A.1})$$

con

$$S(k_x, 0) \equiv \sum_i \frac{1}{r_{ij}^3} \cos(k_x x_i) \quad (\text{A.2})$$

donde  $x_i$  es la componente  $x$  de  $\vec{r}_i$ . Este término puede ser escrito como:

$$S(k_x, 0) = 2 \sum_{x=1}^{\infty} \cos(k_x x) R(x) + 2 \zeta(3) \quad (\text{A.3})$$

con

$$R(x) \equiv \sum_{y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{A.4})$$

$$\zeta(3) \equiv \sum_{y=1}^{\infty} \frac{1}{y^3} \approx 1,202 \quad (\text{A.5})$$

donde  $x, y$  son las coordenadas cartesianas de cada sitio y  $\zeta(x)$  es la función zeta de Riemann.  $R(x)$  puede ser aproximada por:

$$R(x) \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{2}{x^2} \quad (\text{A.6})$$

con un error menor al %1 para el peor de los casos ( $x = 1$ ) [48]. Insertando esto en la Ec. (A.3) se obtiene:

$$\begin{aligned} S(k_x, 0) &\approx 4 \sum_{x=1}^{\infty} \frac{\cos(k_x x)}{x^2} + 2 \zeta(3) \\ &= k_x^2 - 2\pi|k_x| + \frac{2\pi^2}{3} + 2 \zeta(3) \quad \text{para } -2\pi \leq k_x \leq 2\pi \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

que, reemplazada en la Ec.(A.1) nos da la expresión (3.20). La sumatoria del primer término puede ser encontrada en tabla [89].

Para el caso AF:

$$\begin{aligned}
\hat{J}(\pi, \pi) &= -4\delta - \sum_{x,y \neq (0,0)} \frac{(-1)^{x+y}}{r^3} \\
&= -4\delta - 2 \sum_{y=1}^{\infty} \frac{(-1)^y}{y^3} - 2 \sum_{x=1}^{\infty} (-1)^x \sum_{y=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^y}{(\sqrt{x^2 + y^2})^3} \\
&= -4\delta - 4 \sum_{y=1}^{\infty} \frac{(-1)^y}{y^3} - 4 \sum_{x=1}^{\infty} (-1)^x \sum_{y=1}^{\infty} \frac{(-1)^y}{(\sqrt{x^2 + y^2})^3} \\
&= -4\delta + 3\zeta(3) - 4 \sum_{x=1}^{\infty} (-1)^x \sum_{y=1}^{\infty} \frac{(-1)^y}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}}, \tag{A.8}
\end{aligned}$$

donde la sumatoria se obtiene de tabla [89] y el último término se calcula numéricamente.

# Apéndice B

## Sumas de Ewald

Como mencionamos, el problema de aplicar condiciones de contorno periódicas en un sistema con interacciones de largo alcance es complejo. Una forma de solucionar este problema es suponer que tenemos una red de espines infinitamente grande, donde el sistema original de  $N$  espines ha sido replicado infinitas veces en ambas direcciones. En otras palabras, podemos pensar que el sistema infinito ha sido particionado en celdas de tamaño  $N = L \times L$  y que elegimos como solución del problema infinito las soluciones con periodicidad  $L$  en ambas direcciones. De acuerdo a esta visión, cada espín va a interactuar con los espines de la red y sus infinitas réplicas, incluyendo sus propias infinitas réplicas (esto incluye un término de auto-energía generado por la interacción de un espín con sus respectivas réplicas). La forma usual de tratar este problema es mediante una adaptación de la técnica de sumas de Ewald que describimos a continuación.

### B.1. Planteo general

La energía de interacción dipolar para un sistema de espines magnéticos con infinitas réplicas está dada por:

$$E = \sum_{\vec{n}} \sum_{(i,j)} \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n})^3} - 3 \frac{[\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n})][\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n})]}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n})^5} \quad (\text{B.1})$$

donde  $\vec{r}_{ij}$  es la distancia entre espines y  $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$ . Es fácilmente comprobable que

$$E_{ij} \equiv \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} = -S_i^\alpha S_j^\beta \lim_{\vec{x} \rightarrow \vec{r}_{ij}} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{1}{|\vec{x}|}$$

donde usamos la convención de Einstein para la contracción de índices. La energía del sistema dipolar en una red hipercúbica de  $N = L^d$  sitios con condiciones de contorno periódicas viene entonces dada por

$$E = - \sum_{\vec{n}} \sum_{(i,j)} S_i^\alpha S_j^\beta \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{1}{|\vec{x} + \vec{n}|} \Big|_{\vec{x}=\vec{r}_{ij}} \quad (\text{B.2})$$

donde  $\sum_{(i,j)}$  corre sobre todos los pares *diferentes* de sitios en la red  $(i,j)$  y  $\vec{n}$  es un vector de componentes enteras que numera las infinitas “réplicas” del sistema ( $\vec{n} = 0$  corresponde al sistema

original). Debe notarse que estas sumas no son independientes, puesto que deben omitirse los términos  $i = j$  cuando  $\vec{n} = 0$ .

El problema numérico con esta expresión es que la suma en  $\vec{n}$  es débilmente convergente, debido al decaimiento lento de las interacciones dipolares, de manera que truncarla a un orden arbitrario introduce errores considerables. La idea básica de las sumas de Ewald consiste en descomponer esta suma en un conjunto de series rápidamente convergentes que puedan ser truncadas con seguridad.

## B.2. Partición

Vamos a expresar ahora

$$\frac{1}{|\vec{x} + \vec{n}|} = \frac{\operatorname{erfc}(\kappa|\vec{x} + \vec{n}|)}{|\vec{x} + \vec{n}|} + \frac{\operatorname{erf}(\kappa|\vec{x} + \vec{n}|)}{|\vec{x} + \vec{n}|}$$

donde  $\kappa$  es un parámetro de convergencia a ajustar y

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du \quad \operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$$

Podemos entonces expresar  $E = E_1 + E_2$ , donde

$$E_1 = - \sum_{\vec{n}} \sum_{(i,j)} S_i^\alpha S_j^\beta \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{\operatorname{erfc}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|} \Big|_{\vec{x}=\vec{r}_{ij}+\vec{n}} \quad (\text{B.3})$$

$$E_2 = - \sum_{\vec{n}} \sum_{(i,j)} S_i^\alpha S_j^\beta \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{\operatorname{erf}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|} \Big|_{\vec{x}=\vec{r}_{ij}+\vec{n}} \quad (\text{B.4})$$

Analizando la forma de las funciones de error y error complementario, es claro que  $E_1$  representa la contribución de corto alcance de la interacción (erfc decae exponencialmente para valores grandes del argumento) mientras que  $E_2$  representa la parte de largo alcance. Vamos a analizar estos términos por separado.

## B.3. Contribución de corto alcance

Tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial x_\beta} \left( \frac{\operatorname{erfc}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|} \right) = - \frac{x_\beta}{|\vec{x}|^2} \left( \frac{2\kappa}{\sqrt{\pi}} e^{-\kappa^2|\vec{x}|^2} + \frac{\operatorname{erfc}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|} \right)$$

luego

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left( \frac{\operatorname{erfc}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|} \right) &= - \frac{\delta_{\alpha,\beta}}{|\vec{x}|^2} \left( \frac{2\kappa}{\sqrt{\pi}} e^{-\kappa^2|\vec{x}|^2} + \frac{\operatorname{erfc}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|} \right) + \\ &+ \frac{x_\alpha x_\beta}{|\vec{x}|^2} \left[ 3 \frac{\operatorname{erfc}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|^3} + \frac{2\kappa}{\sqrt{\pi}} \left( 2\kappa^2 + \frac{3}{|\vec{x}|^2} \right) e^{-\kappa^2|\vec{x}|^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Podemos por lo tanto expresar

$$E_1 = \sum_{(i,j)} S_i^\alpha S_j^\beta \Gamma_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{r}_{ij}) \quad (\text{B.6})$$

donde

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{x}) = & \delta_{\alpha,\beta} \sum_{\vec{n}} \frac{1}{|\vec{x} + \vec{n}|^2} \left( \frac{2\kappa}{\sqrt{\pi}} e^{-\kappa^2 |\vec{x} + \vec{n}|^2} + \frac{\text{erfc}(\kappa |\vec{x} + \vec{n}|)}{|\vec{x} + \vec{n}|} \right) - \\ & - \sum_{\vec{n}} \frac{(x_\alpha + n_\alpha)(x_\beta + n_\beta)}{|\vec{x} + \vec{n}|^2} \left[ 3 \frac{\text{erfc}(\kappa |\vec{x} + \vec{n}|)}{|\vec{x} + \vec{n}|^3} + \frac{2\kappa}{\sqrt{\pi}} \left( 2\kappa^2 + \frac{3}{|\vec{x} + \vec{n}|^2} \right) e^{-\kappa^2 |\vec{x} + \vec{n}|^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Notemos que al multiplicar la expresión anterior por  $S_i^\alpha S_j^\beta$  y contraer los índices, el segundo término de  $\Gamma_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{r}_{ij})$  resulta proporcional a  $(\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}))(\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}))$ . De esta manera, para el caso de un modelo bidimensional con espines orientados normales al plano de la red el término correspondiente resulta idénticamente nulo. Notemos también que todos los términos de esta serie decaen muy rápido con  $\vec{n}$ . Esto permite truncar la serie en unos pocos términos. De hecho basta con incluir los términos con  $n_\alpha = 0, 1$ , que incluye la interacción de los espines dentro de  $\vec{n} = 0$  y con sus imágenes en los cuadrados primeros y segundos vecinos al área  $\vec{n} = 0$ . Es importante incluir estos últimos para el caso de sitios localizados en bordes diametralmente opuestos ( $r_{ij} \sim L$ , ya que para estos los espines mas cercanos son de hecho las primeras imágenes. Debido a esto no hay problema en permutar las sumas sobre  $(i, j)$  y sobre  $\vec{n}$ , ya que el término que estamos excluyendo de interacción de un espín con sus propias imágenes corresponde a la máxima distancia y esta interacción es despreciable.

## B.4. Contribución de largo alcance

La contribución de largo alcance  $E_2$  no converge rápidamente. Para realizar la suma en  $\vec{n}$  conviene entonces pasar al espacio recíproco, donde la convergencia es mucho mas rápida. Para poder realizar esto debemos permutar las dos sumatorias, para lo cual vamos a sumar y restar el término con  $i = j$  y  $\vec{n} = 0$ . Este término, como veremos es finito. Para ver esto tenemos que calcular:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r}$$

Tenemos que

$$\frac{\partial^2}{\partial r_\alpha^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r} - \frac{r_\alpha^2}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r} + \frac{r_\alpha^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r}$$

Asumiendo que este límite existe y es independiente del camino por el cual  $r \rightarrow 0$ , podemos tomar primero  $r_\beta \rightarrow 0$  con  $\beta \neq \alpha$ , y luego  $r_\alpha = r \rightarrow 0$ . Así

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r}$$

y

$$\lim_{r \rightarrow 0} \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r} = N \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r}$$

Tenemos que

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r} = \frac{2}{r^3} \text{erf}(\kappa r) - \frac{4\kappa}{\sqrt{\pi} r^2} e^{-\kappa^2 r^2} - \frac{4\kappa^3}{\sqrt{\pi}} e^{-\kappa^2 r^2}$$

y usando el comportamiento asintótico para  $x \ll 1$

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( x - \frac{x^3}{3} + \dots \right)$$

obtenemos:

$$-\lim_{r \rightarrow 0} \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha^2} \frac{\text{erf}(\kappa r)}{r} = N \frac{2\kappa^3}{3\sqrt{\pi}} = E^*$$

entonces

$$E_2 = - \sum_{i,j} S_i^\alpha S_j^\beta \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left( \sum_{\vec{n}} \frac{\text{erf}(\kappa |\vec{x} + \vec{n}|)}{|\vec{x} + \vec{n}|} \right) \Big|_{\vec{x}=\vec{r}_{ij}} - E^* \quad (\text{B.8})$$

Sea

$$f(x) = \sum_{\vec{n}} \frac{\text{erf}(\kappa |\vec{x} + \vec{n}|)}{|\vec{x} + \vec{n}|}$$

Vamos a calcular la transformada de Fourier de  $f(x)$ . Para ello, vamos a restringirnos al caso bidimensional  $d = 2$ , con condiciones de contorno periódicas. Vamos además a elegir el eje  $z$  de orientación de los espines normal al plano cristalino. En este caso, todos los  $\vec{n}$  se encuentran sobre el plano. Dado que solo tenemos periodicidad en el plano, tendremos que

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}L} \sum_{k_1, k_2} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{f}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dk_3 \quad (\text{B.9})$$

donde  $k_i = 2\pi l_i/L$  para  $i = 1, 2$ , con  $l_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(L-1)/2, L/2^1$ . Sea  $\Omega$  la celda elemental de área  $L \times L$  ( $\vec{n} = 0$ ). Tenemos que

$$\int_{\Omega} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}} d^3x = 2\pi L^2 \delta_{k_1, k'_1} \delta_{k_2, k'_2} \delta(k_3 - k'_3)$$

de donde podemos invertir la Ec.(B.9) y obtener

$$\bar{f}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}L} \int_{\Omega} f(x) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} d^3x \quad (\text{B.10})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}L} \sum_{\vec{n}} \int_{\Omega} \frac{\text{erf}(\kappa |\vec{x} + \vec{n}|)}{|\vec{x} + \vec{n}|} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} d^3x \quad (\text{B.11})$$

<sup>1</sup>En el caso de redes rectangulares de tamaño  $L_x \times L_y$ , el factor de normalización en (B.9) es  $1/\sqrt{2\pi L_x L_y}$  y las sumas se realizan sobre  $k_{1,2} = 2\pi l_{1,2}/L_{x,y}$ .

Notemos que la integral sobre  $\Omega$  de

$$\frac{\operatorname{erf}(\kappa|\vec{x} + \vec{n}|)}{|\vec{x} + \vec{n}|}$$

es igual a la integral de

$$\frac{\operatorname{erf}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|}$$

sobre una celda centrada en  $-\vec{n}$ . De esta manera

$$\bar{f}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}L} \int \frac{\operatorname{erf}(\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} d^3x \quad (\text{B.12})$$

donde la integral ahora es sobre todo  $\mathbb{R}^3$ . Integrando en coordenadas esféricas

$$\bar{f}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}L} \frac{4\pi}{k\kappa} \int_0^\infty \operatorname{erf}(y) \operatorname{sen}(ay) dy$$

con  $a = k/\kappa$ . De tablas

$$\int_0^\infty \operatorname{erf}(y) \operatorname{sen}(ay) dy = \frac{e^{-a^2/4}}{a}$$

de donde

$$\bar{f}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}L} \frac{4\pi}{k^2} e^{-\frac{k^2}{4\kappa^2}} \quad (\text{B.13})$$

que sustituido en la Ec.(B.9) da

$$f(x) = \frac{2}{L^2} \sum_{k_1, k_2} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{-\frac{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}{4\kappa^2}}}{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} dk_3 \quad (\text{B.14})$$

Este resultado se sustituye en (B.8) y se deriva. Notemos que  $\bar{f}(\vec{k})$  es singular en  $\vec{k} = 0$ , como resultado del decaimiento lento de  $\operatorname{erf}(\kappa|\vec{x}|)/|\vec{x}|$ . No obstante, esta singularidad es “integrable” (en el sentido de que la transformada inversa esta bien definida). Cada derivada  $\partial/\partial x_\alpha$  en (B.8) baja un factor  $ik_\alpha$  (excepto para  $k_1 = k_2 = 0$ , en cuyo caso las derivadas con respecto a los respectivos  $x_\alpha$  se anulan idénticamente). Tenemos entonces:

$$\begin{aligned} E_2 &= \frac{2}{L^2} \sum_{i,j} S_i^\alpha S_j^\beta \sum_{k_1, k_2} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{-\frac{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}{4\kappa^2}}}{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2} k_\alpha k_\beta e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{ij}} dk_3 - E^* \\ &= \frac{2}{L^2} \sum_{i,j} S_i^\alpha S_j^\beta \sum_{k_1, k_2} \cos(k_1 x_1 + k_2 x_2) e^{-\frac{k_1^2 + k_2^2}{4\kappa^2}} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{-\frac{k_3^2}{4\kappa^2}}}{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2} e^{ik_3 x_3} k_\alpha k_\beta dk_3 \Bigg|_{\vec{x}=\vec{r}_{ij}} - E^* \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

donde hemos supuesto una red compuesta por varias capas con condiciones libres en las caras perpendiculares al eje  $z$  y periódicas en los otros ejes. Realizamos las siguientes definiciones:

$$E_2 = \sum_{(i,j)} S_i^\alpha S_j^\beta \Gamma_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{r}_{ij}) \quad (\text{B.16})$$

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{r}_{ij}) = \frac{2}{L^2} \sum_{k_1, k_2} \cos(k_1 r_{ij1} + k_2 r_{ij2}) I_{\alpha\beta}(k_1, k_2, r_{ij3}) \quad (\text{B.17})$$

$$I_{\alpha\beta}(k_1, k_2, r_{ij3}) = e^{-\frac{k_1^2 + k_2^2}{4\kappa^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{k_3^2}{4\kappa^2}}}{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2} e^{ik_3 r_{ij3}} k_\alpha k_\beta dk_3$$

Los términos  $I_{\alpha 3}$  y  $I_{3\alpha}$  para  $\alpha \neq 3$  se anulan en la sumatoria sobre  $k_1, k_2$ . Los términos  $I_{\alpha\beta}$  con  $\alpha, \beta \neq 3$  y  $I_{33}$  no se anulan y son calculados analíticamente. Para simplificar el desarrollo de la primera de estas integrales hacemos los siguientes reemplazos:  $A = 1/2\kappa$ ,  $B^2 = k_1^2 + k_2^2$ ,  $C = r_{ij3}$ :

$$F_1 = e^{-A^2 B^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-A^2 \sigma^2 + iC\sigma}}{B^2 + \sigma^2} d\sigma \quad (\text{B.18})$$

$$= e^{-A^2 B^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-A^2 \sigma^2 + iC\sigma} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-B|\xi|}}{B} e^{-i\sigma\xi} d\xi \right\} d\sigma \quad (\text{B.19})$$

$$= \frac{e^{-A^2 B^2}}{2B} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-B|\xi|} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-A^2 \sigma^2 + i(C-\xi)\sigma} d\sigma d\xi \quad (\text{B.20})$$

$$= \frac{e^{-A^2 B^2}}{2B} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-B|\xi|} \frac{\sqrt{\pi}}{|A|} e^{-\frac{(C-\xi)^2}{4A^2}} d\xi \quad (\text{B.21})$$

$$= \frac{\sqrt{\pi} e^{-\frac{C^2}{4A^2} - A^2 B^2}}{2B|A|} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{4A^2} - B|\xi| + \frac{2C\xi}{4A^2}} d\xi \quad (\text{B.22})$$

$$= \frac{\sqrt{\pi} e^{-\frac{C^2}{4A^2} - A^2 B^2}}{2B|A|} \left\{ \int_0^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{4A^2} + (\frac{C}{2A^2} - B)\xi} d\xi + \int_0^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{4A^2} - (\frac{C}{2A^2} + B)\xi} d\xi \right\} \quad (\text{B.23})$$

$$= \frac{\pi e^{-\frac{C^2}{4A^2} - A^2 B^2}}{2B} \left\{ e^{A^2 (B - \frac{C}{2A^2})^2} \operatorname{erfc} \left[ A \left( B - \frac{C}{2A^2} \right) \right] + e^{A^2 (B + \frac{C}{2A^2})^2} \operatorname{erfc} \left[ A \left( B + \frac{C}{2A^2} \right) \right] \right\} \quad (\text{B.24})$$

$$= \frac{\pi}{2B} \left\{ e^{-BC} \operatorname{erfc} \left[ A \left( B - \frac{C}{2A^2} \right) \right] + e^{BC} \operatorname{erfc} \left[ A \left( B + \frac{C}{2A^2} \right) \right] \right\} \quad (\text{B.25})$$

donde hemos reemplazado  $\frac{1}{B^2 + \sigma^2}$  por su transformada de *Fourier* en (B.19) y hemos extraído de tablas las integrales de las ecuaciones (B.20) y (B.23)[89]. Reemplazando por las cantidades correspondientes, obtenemos:

$$F_1(k_1, k_2, r_{ij3}) = \frac{\pi}{2\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \left[ e^{-\sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} - 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right) + e^{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} + 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right) \right] \quad (\text{B.26})$$

La integral a resolver en el caso de  $I_{33}$  se calcula mediante la expresión  $-\frac{\partial^2 F_1(k_1, k_2, x_3)}{\partial x_3^2} \Big|_{\vec{x}=\vec{r}_{ij}}$  :

$$\begin{aligned}
F_2(k_1, k_2, r_{ij3}) &= \frac{\pi}{2\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \times \\
&\times \left\{ \frac{2\kappa(\sqrt{k_1^2 + k_2^2} + 2\kappa^2 r_{ij3})}{\sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} - 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right)^2 - \sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3} \right] + \right. \\
&+ \frac{2\kappa(\sqrt{k_1^2 + k_2^2} - 2\kappa^2 r_{ij3})}{\sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} + 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right)^2 + \sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3} \right] + \\
&- (k_1^2 + k_2^2) e^{-\sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} - 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right) + \\
&\left. - (k_1^2 + k_2^2) e^{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} + 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right) \right\} \quad (\text{B.27})
\end{aligned}$$

Quedando las funciones  $I_{\alpha,\beta}$ :

$$I_{33}(k_1, k_2, r_{ij3}) = F_2(k_1, k_2, r_{ij3})$$

$$I_{11}(k_1, k_2, r_{ij3}) = k_1^2 F_1(k_1, k_2, r_{ij3}) \quad \text{para } (k_1, k_2) \neq (0, 0)$$

$$I_{22}(k_1, k_2, r_{ij3}) = k_2^2 F_1(k_1, k_2, r_{ij3}) \quad \text{para } (k_1, k_2) \neq (0, 0)$$

$$I_{12}(k_1, k_2, r_{ij3}) = I_{21}(k_1, k_2, r_{ij3}) = k_1 k_2 F_1(k_1, k_2, r_{ij3}) \quad \text{para } (k_1, k_2) \neq (0, 0)$$

$$I_{11}(0, 0, r_{ij3}) = I_{22}(0, 0, r_{ij3}) = I_{12}(0, 0, r_{ij3}) = I_{21}(0, 0, r_{ij3}) = 0$$

Tanto  $F_1$  como  $F_2$  decaen exponencialmente con  $k$  por lo que la serie (B.17) converge rápidamente y puede ser truncada en un orden finito relativamente pequeño.

## B.5. Detalles de implementación

### Truncado

Las sumas en  $k_1, k_2$  pueden truncarse a un orden finito  $k_i = 2\pi l_i/L$  con  $l_i = 0, \pm 1, \dots, \pm l_{max}$  para  $i = 1, 2$ . La experiencia en simulaciones en diversos tipos de interacciones y diferentes dimensionalidades indica que un valor razonable es  $l_{max} = 10$ , conjuntamente con un valor de  $\kappa = 5/L$ .

### Actualización de Monte Carlo

La energía del sistema dipolar bidimensional puede entonces escribirse como

$$\begin{aligned}
E &= \sum_{(i,j)} S_i^\alpha S_j^\beta \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}_{ij}) \\
&= \sum_{(i,j)} \left[ S_i^3 S_j^3 \Gamma_{33}(\vec{r}_{ij}) + \sum_{\alpha,\beta=1}^2 S_i^\alpha S_j^\beta \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}_{ij}) \right] \quad (\text{B.28})
\end{aligned}$$

donde

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}_{ij}) = \Gamma_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{r}_{ij}) + \Gamma_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{r}_{ij})$$

donde las matrices  $\Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}_{ij})$  se calculan una sola vez al principio de la simulación. Para el algoritmo de Metrópolis la diferencia de energía dipolar debida a un movimiento

$$\vec{S}_i \rightarrow \vec{S}_i + \Delta\vec{S}_i$$

viene dada por

$$\Delta E = \Delta S_i^3 \sum_{j \neq i} \Gamma_{33}(\vec{r}_{ij}) S_j^3 + \sum_{\alpha=1}^2 \Delta S_i^\alpha \sum_{j \neq i} \sum_{\beta=1}^2 S_j^\beta \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}_{ij})$$

Notemos que podemos expresar el cambio en la energía como

$$\Delta E = \Delta\vec{S}_i \cdot \vec{h}_i$$

donde los *campos locales*  $\vec{h}_i$  vienen dados por

$$\vec{h}_i = \sum_{j \neq i} \Gamma(\vec{r}_{ij}) \vec{S}_j$$

donde  $\Gamma(\vec{r}_{ij})$  es una matriz  $3 \times 3$  cuyos elementos son  $\Gamma_{\alpha\beta}(0) = 0$  y  $\Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}_{ij}) = \Gamma_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{r}_{ij}) + \Gamma_{\alpha\beta}^{(2)}(\vec{r}_{ij})$  para  $\vec{r}_{ij} \neq \vec{0}$ . Resulta conveniente calcular todos los campos locales al principio de la simulación y luego actualizarlos solo cuando se acepta un “espín flip”

$$\vec{S}_i \rightarrow \vec{S}_i + \Delta\vec{S}_i$$

En este caso tenemos que

$$\vec{h}_j \rightarrow \vec{h}_j + \Delta\vec{h}_j$$

con

$$\Delta\vec{h}_j = \Gamma(\vec{r}_{ji}) \Delta\vec{S}_i$$

## Resumen de fórmulas

Podemos expresar de manera mas compacta las interacciones efectivas  $\Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}_{ij})$  introduciendo las siguientes definiciones:

$$G_1(\vec{r}_{ij}) = \sum_{\vec{n}} \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^2} \left( \frac{2\kappa}{\sqrt{\pi}} e^{-\kappa^2 |\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^2} + \frac{\text{erfc}(\kappa |\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} \right)$$

$$G_2(\vec{r}_{ij}, \vec{n}) = \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^2} \left[ 3 \frac{\text{erfc}(\kappa |\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^3} + \frac{2\kappa}{\sqrt{\pi}} \left( 2\kappa^2 + \frac{3}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^2} \right) e^{-\kappa^2 |\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^2} \right]$$

y las funciones  $F_1$  y  $F_2$ :

$$F_1(k_1, k_2, r_{ij3}) = \frac{\pi}{2\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \left[ e^{-\sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} - 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right) + e^{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} + 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right) \right] \quad (\text{B.29})$$

$$F_2(k_1, k_2, r_{ij3}) = \frac{\pi}{2\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \times \left\{ \frac{2\kappa(\sqrt{k_1^2 + k_2^2} + 2\kappa^2 r_{ij3})}{\sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} - 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right)^2 - \sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3} \right] + \frac{2\kappa(\sqrt{k_1^2 + k_2^2} - 2\kappa^2 r_{ij3})}{\sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} + 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right)^2 + \sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3} \right] + (k_1^2 + k_2^2) e^{-\sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} - 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right) + (k_1^2 + k_2^2) e^{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} r_{ij3}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2 + k_2^2} + 2\kappa^2 r_{ij3}}{2\kappa} \right) \right\} \quad (\text{B.30})$$

Tenemos:

$$\Gamma_{33}(\vec{r}_{ij}) = G_1(\vec{r}_{ij}) + \frac{2}{L^2} \sum_{k_1, k_2} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}) F_2(k_1, k_2, r_{ij3}) \quad (\text{B.31})$$

$$\Gamma_{11}(\vec{r}_{ij}) = G_1(\vec{r}_{ij}) - \sum_{\vec{n}} (r_{ij1} + n_1)^2 G_2(\vec{r}_{ij}, \vec{n}) + \frac{2}{L^2} \sum'_{k_1, k_2} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}) k_1^2 F_1(k_1, k_2, r_{ij3}) \quad (\text{B.32})$$

$$\Gamma_{22}(\vec{r}_{ij}) = G_1(\vec{r}_{ij}) - \sum_{\vec{n}} (r_{ij2} + n_2)^2 G_2(\vec{r}_{ij}, \vec{n}) + \frac{2}{L^2} \sum'_{k_1, k_2} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}) k_2^2 F_1(k_1, k_2, r_{ij3}) \quad (\text{B.33})$$

$$\Gamma_{12}(\vec{r}_{ij}) = \Gamma_{21}(\vec{r}_{ij}) = - \sum_{\vec{n}} (r_{ij1} + n_1)(r_{ij2} + n_2) G_2(\vec{r}_{ij}, \vec{n}) + \frac{2}{L^2} \sum'_{k_1, k_2} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}) k_1 k_2 F_2(k_1, k_2) \quad (\text{B.34})$$

para  $\vec{r}_{ij} \neq \vec{0}$  y donde se asume el truncamiento en todas las sumas y  $\sum'$  excluye el término  $k_1 = k_2 = 0$ . Además  $\Gamma_{13}$ ,  $\Gamma_{31}$ ,  $\Gamma_{23}$  y  $\Gamma_{32}$  se anulan en la sumatoria sobre  $k_1, k_2$ .

## Casos especiales

Analizaremos brevemente dos casos especiales donde pueden realizarse algunas simplificaciones en las ecuaciones, el primero corresponde a un sistema Heisenberg monocapa y el segundo a un

Ising monocapa. Este último trabajo fue realizado por Rogelio Díaz-Méndez<sup>2</sup> y fue el puntapié del trabajo sobre el Heisenberg monocapa y su posterior generalización a varias capas.

En el caso de una monocapa,  $G_1$  y  $G_2$  permanecen inalteradas, mientras que  $F_1$  y  $F_2$  quedan:

$$F_1(k_1, k_2) = 2\kappa\sqrt{\pi} \left[ e^{-\frac{k_1^2+k_2^2}{4\kappa^2}} - \sqrt{\pi} \frac{\sqrt{k_1^2+k_2^2}}{2\kappa} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2+k_2^2}}{2\kappa} \right) \right]$$

$$F_2(k_1, k_2) = \frac{\pi}{\sqrt{k_1^2+k_2^2}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{k_1^2+k_2^2}}{2\kappa} \right)$$

donde se ha eliminado la componente  $r_{ij3}$ .

Para el caso de espines *Ising*, estos sólo tienen componente  $S_i^3$ , por lo que sólo es necesario calcular  $\Gamma_{33}$ , obtenida de las ecuaciones para  $G_1$  y  $F_2$  anteriores.

---

<sup>2</sup>e-mail: rogelio@ff.oc.uh.cu

# Apéndice C

## Teoría de Yafet y Gyorgy, Ec. (5.2)

Procedemos en esta sección a calcular los diferentes términos de la energía para un estado de fajas rectas verticales con paredes de *Bloch* siguiendo el procedimiento utilizado por Yafet y Gyorgy [51].

### Energía dipolar

En primer lugar consideremos la energía dipolar:

$$E_{dip} = \sum_{(i,j)} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (C.1)$$

donde los pares de espines en la suma son contados solamente una vez. Para el caso particular de las soluciones que estamos considerando, la ecuación de arriba puede ser escrita de la forma:

$$E_{dip} = E_s^d + E_{int}^d \quad (C.2)$$

$$E_s^d = \sum_x E_s^d(x) \quad (C.3)$$

$$E_{int}^d = \frac{1}{2} \sum_{x \neq x'} E_{int}^d(x, x') \quad (C.4)$$

donde  $E_s^d(x)$  es la autoenergía de la línea  $x$ , i.e., la energía de interacción entre los espines de la línea  $x$  y  $E_{int}^d(x, x')$  es la energía de interacción entre las líneas  $x$  y  $x'$ . Ambos términos son considerados por separado.

### Cálculo de la autoenergía $E_s^d(x)$

Para un dado  $x$ , la Ec. (5.1) implica que  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = 1$ . Al reemplazar en la Ec. (C.1) tenemos

$$E_s^d(x) = \frac{1}{2} \sum_{y \neq y'} (1 - 3 [M^y(x)]^2) \frac{1}{|y - y'|^3} \quad (C.5)$$

$$\sim -2 L g + 3 L g [M^z(x)]^2 \quad (C.6)$$

para  $L \gg 1$ , donde hemos empleado la Ec.(5.1) y en donde

$$g = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} = \zeta(3) = 1,202057 \quad (\text{C.7})$$

con  $\zeta(x)$  la función Zeta de Riemann.

Entonces,

$$E_s^d/N = -2g + \frac{3g}{L} \sum_x [M^z(x)]^2 \quad (\text{C.8})$$

### Cálculo de la energía de interacción $E_{int}^d(x, x')$

La energía de interacción entre dos líneas situadas en  $x$  y  $x+n$  está dada por

$$\begin{aligned} E_{int}^d(x, x+n) &= \frac{1}{2} M^z(x) M^z(x+n) \sum_{y,y'} \frac{1}{[n^2 + (y-y')^2]^{3/2}} \\ &+ \frac{1}{2} M^y(x) M^y(x+n) \sum_{y,y'} \left\{ \frac{1}{[n^2 + (y-y')^2]^{3/2}} - 3 \frac{(y-y')^2}{[n^2 + (y-y')^2]^{5/2}} \right\} \\ &= L M^z(x) M^z(x+n) f_1(n) + L M^y(x) M^y(x+n) (f_1(n) - 3 f_2(n)) \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

donde

$$f_1(n) = \frac{1}{2L} \sum_{y,y'} \frac{1}{[n^2 + (y-y')^2]^{3/2}} \quad (\text{C.10})$$

$$f_2(n) = \frac{1}{2L} \sum_{y,y'} \frac{(y-y')^2}{[n^2 + (y-y')^2]^{5/2}}. \quad (\text{C.11})$$

En el límite de  $L \rightarrow \infty$  tenemos:

$$f_1(n) \sim \frac{1}{2n^3} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{[n^2 + k^2]^{3/2}} \quad (\text{C.12})$$

$$f_2(n) \sim \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k^2}{[n^2 + k^2]^{5/2}}. \quad (\text{C.13})$$

Para  $n$  suficientemente grande, aplicamos la aproximación continua a  $f_1$  y  $f_2$ :

$$\begin{aligned} f_1(n) &\sim \frac{1}{2n^3} + \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{[1 + (k/n)^2]^{3/2}} \frac{1}{n} \\ &\sim \frac{1}{n^2} \int_0^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{3/2}} + \mathcal{O}(n^{-3}) \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

$$f_2(n) \sim \frac{1}{n^2} \int_0^\infty \frac{x^2}{(1+x^2)^{5/2}} dx. \quad (\text{C.15})$$

Sabemos que,

$$\int_0^\infty \frac{dx}{(1+x^2)^{3/2}} = 1$$

$$\int_0^\infty \frac{x^2}{(1+x^2)^{5/2}} dx = \frac{1}{3},$$

entonces

$$f_1(n) \sim 1/n^2 \quad (\text{C.16})$$

$$f_1(n) - 3f_2(n) \sim 0. \quad (\text{C.17})$$

Corroboremos la validez de esta aproximación. Los valores exactos de la serie pueden ser calculados numéricamente usando *Mathematica* por medio de la suma de las Ec. (C.12) y (C.13) hasta la precisión deseada. Los resultados son comparados en la siguiente tabla:

| $n$ | $f_1(n)$    | $f_1(n) - 1/n^2$      | $f_1(n) - 3f_2(n)$    |
|-----|-------------|-----------------------|-----------------------|
| 1   | 1,01243     | 0,01243               | 0,07276               |
| 2   | 0,250008    | $7,97 \times 10^{-6}$ | $9,64 \times 10^{-5}$ |
| 3   | 0,111111119 | $7,98 \times 10^{-9}$ | $1,47 \times 10^{-7}$ |

Es evidente que la aproximación continua es excelente para  $n \geq 2$ . Notar que Yafet y Gyorgy obtuvieron errores mayores [51], especialmente para  $n = 2$ , probablemente esto se deba a que incluyeron un número menor de términos en la suma. Hay que recordar que este trabajo data de 1988 y es probable que hayan usado una computadora XT o una calculadora de mano. Para obtener convergencia de las sumas hasta el quinto decimal, es necesario sumar por lo menos 10000 términos.

De esta manera y, con un error menor que el 0,01 % podemos aproximar:

$$\frac{E_{int}^d(x, x')}{L} = \frac{M^z(x) M^z(x')}{|x - x'|^2} \quad \text{para } |x - x'| > 1 \quad (\text{C.18})$$

$$\begin{aligned} \frac{E_{int}^d(x, x+1)}{L} &= (c_1 + 1)M^z(x) M^z(x+1) + c_2 M^y(x) M^y(x+1) \\ &= M^z(x) M^z(x+1) \\ &+ c_1 [M^z(x) M^z(x+1) + M^y(x) M^y(x+1)] \\ &+ (c_2 - c_1) M^y(x) M^y(x+1). \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

donde  $c_1 = 0,01243$  y  $c_2 = 0,07276$ . El primer término de la expresión generaliza la Ec. (C.18) a todos los valores posibles de  $|x - x'|$ , el segundo introduce una corrección a la constante de intercambio y el tercero representa una interacción de intercambio en la componente planar.

## Energías de anisotropía e intercambio

La contribución de la anisotropía a la energía se expresa directamente como:

$$E_{an}/N = -\eta \frac{1}{L} \sum_x [M^z(x)]^2. \quad (C.20)$$

El cálculo de la contribución por intercambio no presenta mayores dificultades. De la Ec.(5.1), la energía de intercambio de la línea es:  $E_s^{ex}/N = -\delta$ . La interacción entre líneas adyacentes se puede escribir de la forma:

$$E_{int}^{ex}/N = -\delta \frac{1}{L} \sum_x \vec{M}(x) \cdot \vec{M}(x+1) \quad (C.21)$$

## Energía total

Incorporando todas todas las contribuciones, la energía por espín queda expresada de la forma:

$$e[\vec{M}(x)] = -(2g + \delta) - \frac{\delta'}{L} \sum_x \vec{M}(x) \cdot \vec{M}(x+1) + \frac{1}{L} \sum_{x,x'} \frac{M^z(x) M^z(x')}{|x-x'|^2} - \frac{\kappa'}{L} \sum_x [M^z(x)]^2 + C [M^y(x)] \quad (C.22)$$

donde  $\delta' = \delta - 2c_1$ ,  $\kappa' = \eta - 3g$ , la suma  $\sum_{x,x'}$  es sobre todos los valores de  $x \neq x'$  y

$$C[M^y(x)] = \frac{2(c_2 - c_1)}{L} \sum_x M^y(x) M^y(x+1). \quad (C.23)$$

Es conveniente aclarar que cada par de sitios en esta suma es contado dos veces ya que un factor 1/2 ha sido incluido en la Ec. (C.9).  $e[\vec{M}(x)]$  es una funcional del campo de magnetización  $\vec{M}(x)$  con la restricción dada por la Ec. (5.1). De esta expresión se puede deducir que la energía del estado planar está dada por  $e_{||} = -(2g + \delta) - \delta' + 2(c_2 - c_1)$ . Reescribiremos la energía de una configuración de fajas en función de la energía de la fase planar:

$$e[\vec{M}(x)] = \delta' - \frac{\delta'}{L} \sum_x \vec{M}(x) \cdot \vec{M}(x+1) + \frac{1}{L} \sum_{x,x'} \frac{M^z(x) M^z(x')}{|x-x'|^2} - \frac{\kappa'}{L} \sum_x [M^z(x)]^2 + C [M^y(x)] \quad (C.24)$$

donde hemos omitido la constante  $-2(c_2 - c_1)$ .

# Apéndice D

## Cálculo de la energía para valores de $\delta$ pequeños

En esta sección calculamos la energía de un perfil de magnetización con pared sinusoidal (PS) dado por la Ec. (5.13) para valores de  $\delta$  pequeños, utilizando la Ec. (5.2). En este límite no es válida la aproximación continua y las expresiones se deben calcular sumando las series. La energía de anisotropía se obtiene directamente:

$$\begin{aligned} e_{an} &= -\frac{\kappa'}{2h} \sum_{x=1}^{2h} [M^z(x)]^2 \\ &= \begin{cases} -\kappa' M_0^2 & \text{si } w = 1 \\ -\kappa' M_0^2 (1 - \frac{\Delta}{2}) & \text{si } w \neq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

donde  $\Delta \equiv w/h$ .

Para el cálculo de la contribución dipolar utilizamos la Ec. (5.9). Para ello se calculan los coeficientes de la serie de *Fourier* en el espacio discreto. Esto es más simple si tomamos el perfil de Ec. (5.13) desplazado en  $x \rightarrow x - (h - w)/2$ . Esto es:

$$M^z(x) = \frac{M_0}{2h} \sum_{m=1,3,\dots}^{2h+1} c_m e^{i\frac{\pi m}{h}x}. \quad (\text{D.2})$$

donde los coeficientes  $b_m$  de la expansión (5.6) están dados por:

$$b_m = \frac{1}{2h} \mathcal{R} [c_m e^{i\pi m(h-w)/2h}] \quad (\text{D.3})$$

donde  $\mathcal{R}[z]$  es la parte real de  $z$ . Los coeficientes  $c_m$  están dados por:

$$c_m = \frac{1}{M_0} \sum_{x=1}^{2h} M^z(x) e^{-i\frac{\pi m}{h}x} \quad (\text{D.4})$$

$$= \frac{2}{M_0} \sum_{x=0}^{h-1} M^z(x) e^{-i\frac{\pi m}{h}x} \quad (\text{D.5})$$

$$= 2 \sum_{x=0}^{w-1} \cos\left(\frac{\pi x}{w}\right) e^{-i\frac{\pi m}{h}x} - 2 \sum_{x=w}^{h-1} e^{-i\frac{\pi m}{h}x} \quad (\text{D.6})$$

$$= 2 \sum_{x=0}^{w-1} \cos\left(\frac{\pi x}{w}\right) e^{-i\frac{\pi m}{h}x} - 2 \sum_{x=0}^{h-1-w} e^{-i\frac{\pi m}{h}(x+w)}. \quad (\text{D.7})$$

Ahora tomamos el primer término y lo desarrollamos en exponenciales complejas:

$$2 \sum_{x=0}^{w-1} \cos\left(\frac{\pi x}{w}\right) e^{-i\frac{\pi m}{h}x} = \sum_{x=0}^{w-1} (e^{i\frac{\pi}{w}x} + e^{-i\frac{\pi}{w}x}) e^{-i\frac{\pi m}{h}x} \quad (\text{D.8})$$

$$= \sum_{x=0}^{w-1} (e^{i\pi\alpha_+})^x + \sum_{x=0}^{w-1} (e^{i\pi\alpha_-})^x \quad (\text{D.9})$$

donde  $\alpha_{\pm} = (\pm\frac{1}{w} - \frac{m}{h})$ . La solución de cada término está dada por la siguiente expresión:

$$f(\alpha_{\pm}) \equiv \sum_{x=0}^{w-1} (e^{i\pi\alpha_{\pm}})^x = \begin{cases} \frac{1-e^{i\pi\alpha_{\pm}w}}{1-e^{i\pi\alpha_{\pm}}} & \text{si } e^{i\pi\alpha_{\pm}} \neq 1 \\ w & \text{si } e^{i\pi\alpha_{\pm}} = 1 \end{cases} \quad (\text{D.10})$$

El tratamiento del segundo término en la Ec. (D.7) es similar y da como resultado la siguiente expresión:

$$g(m) \equiv 2 \frac{e^{i\pi mw/h} + 1}{e^{i\pi m/h} - 1} \quad (\text{D.11})$$

Finalmente, los coeficientes se obtienen sumando todos los términos  $c_m = f(\alpha_+) + f(\alpha_-) + g(m)$ . La contribución de los términos de intercambio y la corrección  $C[M^y]$  de la Ec. (5.12) pueden ser expresados de la forma:

$$e_{exc} = -\delta' \frac{1}{h} \sum_{x=0}^{w-1} \vec{M}(x) \cdot \vec{M}(x+1) - \delta'(1-\Delta) M_0^2, \quad (\text{D.12})$$

$$C[M^y(x)] = \frac{2(c_2 - c_1)}{h} \sum_{x=0}^{w-1} M^y(x) M^y(x+1) + 2(c_2 - c_1)(1-\Delta)(1-M_0^2) \quad (\text{D.13})$$

Las sumas en estas ecuaciones involucran un número finito de términos que pueden ser computados explícitamente.

# Apéndice E

## Minimización de la energía mediante simulaciones de Monte Carlo

En esta sección describimos un método basado en baño térmico para conocer el estado fundamental del modelo de *Heisenberg* dipolar. Asumimos que el estado de mínima energía del modelo corresponde a un estado de fajas con paredes de *Bloch*. Esta suposición está totalmente fundada en resultados previos (ver Cap. 2). Bajo esta suposición es posible reducir el número de parámetros libres de la simulación, reduciendo dramáticamente el tiempo de cálculo.

En primer lugar, hacemos notar que el análisis efectuado en el Cap. II sobre condiciones periódicas de contorno, puede ser generalizado a redes de tamaño  $L_x \times L_y$ . Para ello es necesario generalizar las sumas de *Ewald* a redes rectangulares (ver Apéndice B). Estas redes reproducen el comportamiento de sistemas infinitos teniendo en cuenta solamente las soluciones con periodicidad  $L_x \times L_y$ . En particular, una solución de fajas sin fluctuaciones posee periodicidad  $L_x \times 1$ . La suposición de que el estado de mínima energía está dado por fajas con paredes de *Bloch*, elimina un parámetro libre en el estado de cada espín. Si la red se extiende a lo largo del eje  $x$ , los espines poseen componente  $S^x = 0$ . Ésto, más el vínculo dado por la Ec. (5.1) reducen el problema de complejidad  $\mathcal{O}(L^4)$  parámetros libres a uno con  $\mathcal{O}(L^2)$  parámetros libres.

Como mencionamos, el protocolo de simulación que se utiliza es el de baño térmico. Partimos una configuración aleatoria a temperatura  $T = 1$  y disminuimos la temperatura con tasa  $r = 10^{-4}$  hasta alcanzar  $T = 0$ . Esto constituye una variante del método de “simulated annealing” con una variación lineal de la temperatura. Pruebas exhaustivas muestran que la configuración inicial no afecta el resultado final. Durante la simulación se guarda la configuración que registra menor energía. El proceso de actualización del espín viene dado por la siguiente regla:

$$\vec{S}' = \frac{\vec{S} + \vec{v}}{|\vec{S} + \vec{v}|}$$

donde  $\vec{S}'$  es el nuevo valor del espín y  $\vec{v}$  es un vector que posee dirección aleatoria en el plano  $y, z$ . Su módulo se elige de acuerdo a la cantidad de veces que el algoritmo de Metrópolis acepta un cambio de espines. Cada 1000 MCS se cambia el valor de  $v = |\vec{v}|$  siguiendo el siguiente procedimiento: se parte de un valor inicial pequeño  $v_0 = 0,1$  y se llama al algoritmo de metrópolis  $10 \times L_x$  veces. Se calcula la cantidad de actualizaciones aceptadas dividido el total de intentos. Si este valor es menor a la tasa de aceptación requerida, el protocolo termina, sino se vuelve a intentar con  $v = v_0 + 0,1$  y así sucesivamente. El algoritmo corta automáticamente al alcanzar  $v = 3$ , que corresponde prácticamente a una actualización aleatoria. Si la tasa de aceptación requerida

es alta,  $v$  es pequeño entonces el espín actualizado se encuentra en una dirección próxima a la inicial. Con esta tasa el sistema queda atrapado en mínimos locales. Si la tasa es menor,  $v$  es más grande y el sistema puede rechazar más configuraciones, explorando mejor el espacio de fases. El límite inferior de las tasas de aceptación lo constituye la actualización aleatoria, en el cual no hay correlación entre la dirección del espín antes y después de la actualización. A bajas temperaturas, esto resulta en una gran cantidad de tiempo de cómputo. La tasa de aceptación fijada para las simulaciones es de 0,001, un número aparentemente pequeño siendo que el máximo es 1. Pero, para estas tasas, los valores observados de  $v$  oscilan entre 0,5 y 1,5. Luego de alcanzada la temperatura cero, se corren  $10^3$  MCS con  $v$  fijo en el valor  $v = 0,01$  y  $10^3$  MCS con  $v = 0,001$  para eliminar cualquier efecto de fluctuación térmica. El protocolo descrito es repetido 100 veces partiendo de estados aleatorios para evitar cualquier metaestabilidad. Como la configuración de menor energía se calcula de manera independiente para cada valor de  $\eta$ , la ausencia de metaestabilidades se comprueba evaluando la suavidad de las curvas de energía en función de  $\eta$ .

Hay que aclarar que al calcular estados fundamentales, hay que elegir con mucho cuidado los tamaños de la red, ya que no pueden existir inconmesurabilidades. Los resultados obtenidos fueron contrastados con los correspondientes a redes de tamaño  $L \times L$ , encontrándose un perfecto acuerdo.

En este método, el valor  $M_0$  se obtiene a través de la siguiente expresión:

$$M_0 = \max_x M^z(x). \quad (\text{E.1})$$

El ángulo canted queda entonces definido por la relación  $\theta = \arccos M_0$ . Estas definiciones son equivalentes a las utilizadas por los otros métodos.

# Apéndice F

## Ecs. variacionales para perfiles con pared sinusoidal (PS) en el límite continuo

En el límite continuo,  $h \gg 1$  y  $w \gg 1$  aplicamos la aproximación de perfiles suaves, Ec (5.4) y la energía (Ec. (5.12)) puede ser escrita como:

$$e[\vec{M}, \delta, \eta] = \delta - \frac{\delta}{L} \sum_x \cos(\phi(x) - \phi(x+1)) + M_0^2 \sum_{m=1,3,\dots} b_m^2 D_m(h) - \frac{\kappa M_0^2}{2} \sum_{m=1,3,\dots} b_m^2 + C[M^y(x)] \quad (\text{F.1})$$

a menos de un término constante  $2c_2$ , donde  $\kappa = \eta - 3g + 2(c_2 - c_1)$ .

Los coeficientes de *Fourier* pueden ser calculados de la expresión

$$M_0 b_m = \frac{2}{h} \int_0^h M^z(x) \cos\left(\frac{m\pi x}{h}\right) dx$$

Usando las Ecs.(5.13), cuentas mediante, obtenemos

$$\begin{aligned} b_m &= \frac{4}{\pi m} \frac{1}{1 - m^2 \Delta^2} \cos\left(\frac{\pi m \Delta}{2}\right) \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right) \\ &= (-1)^{(m-1)/2} \frac{4}{\pi m} \frac{1}{1 - m^2 \Delta^2} \cos\left(\frac{\pi m \Delta}{2}\right) \end{aligned} \quad (\text{F.2})$$

donde  $\Delta \equiv w/h$ .

### Término de anisotropía

La forma más simple de calcular la anisotropía es sumando directamente la expresión:

$$e_{an} = -\frac{\kappa}{h} \sum_{x=1}^h [M^z(x)]^2 \quad (\text{F.3})$$

$$= -\frac{\kappa M_0^2}{h} \left[ (h-w) + \sum_{x=1}^w \cos^2\left(\frac{\pi x}{w}\right) \right] \quad (\text{F.4})$$

$$= -\kappa M_0^2 \left[ (1-\Delta) + \frac{\Delta}{w} \sum_{x=1}^w \cos^2\left(\frac{\pi x}{w}\right) \right]. \quad (\text{F.5})$$

En el límite de perfil suave  $w \gg 1$ , tenemos que

$$\frac{1}{w} \sum_{x=1}^w \cos^2\left(\frac{\pi x}{w}\right) \sim \int_0^1 \cos^2(\pi u) du = \frac{1}{2}$$

este último resultado es exacto si asumiéramos  $w$  entero con  $w > 1$ . Por lo tanto,

$$e_{an} = -\kappa M_0^2 \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right). \quad (\text{F.6})$$

Si comparamos con la Ec.(5.7) se encuentra que

$$\sum_{m=1,3,\dots} b_m^2 = (2 - \Delta). \quad (\text{F.7})$$

Expresión que será de gran utilidad en breve.

### Término dipolar

Para valores de  $h$  grandes,  $D_m(h)$  puede ser aproximada por

$$D_m(h) = \frac{\pi^2}{6} - \frac{\pi}{2} \left(\frac{m\pi}{h}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{h^2}\right) \quad (\text{F.8})$$

entonces

$$e_{dip} = M_0^2 \left[ \frac{\pi^2}{6} (2 - \Delta) - \frac{\pi k}{2} G(\Delta) \right] \quad (\text{F.9})$$

donde hemos usado la Ec.(F.7),  $k \equiv \pi/h$  y

$$G(\Delta) \equiv \sum_{m=1,3,\dots} m b_m^2(\Delta) \quad (\text{F.10})$$

Las propiedades generales de la función  $G(\Delta)$  se analizan en el Apéndice G.

### Término de intercambio

En el límite de perfil suave  $w \gg 1$ , donde  $|\phi(x) - \phi(x+1)| \ll 1$  tenemos:

$$\begin{aligned} \cos(\phi(x) - \phi(x+1)) &\approx 1 - \frac{1}{2}(\phi(x) - \phi(x+1))^2 \\ &\sim 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{d\phi(x)}{dx} \right)^2. \end{aligned}$$

Entonces

$$e_{exc} = -\delta + \frac{\delta}{2h} \sum_{x=1}^h \left( \frac{d\phi(x)}{dx} \right)^2 \approx -\delta + \frac{\delta\Delta}{2w} \sum_{x=1}^w \left( \frac{d\phi(x)}{dx} \right)^2. \quad (\text{F.11})$$

Usando la relación  $M_0 = \cos \theta$ , donde  $\theta$  es el ángulo canted, en la región dentro de la pared tenemos que  $\cos(\phi(x)) = \cos(\theta) \cos(\pi x/w)$ . Si derivamos esta expresión con respecto a  $x$  nos queda:

$$\text{sen}\phi(x) \frac{d\phi}{dx} = \frac{\pi}{w} \cos \theta \text{sen}(\pi x/w),$$

entonces:

$$\begin{aligned} \left( \frac{d\phi(x)}{dx} \right)^2 &= \frac{\pi^2}{w^2} \frac{\cos^2 \theta \text{sen}^2(\pi x/w)}{1 - \cos^2 \theta \cos^2(\pi x/w)} \\ \frac{1}{w} \sum_{x=1}^w \left( \frac{d\phi(x)}{dx} \right)^2 &\approx \frac{\pi}{w^2} \cos^2 \theta \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2 u}{1 - \cos^2 \theta \cos^2 u} du \end{aligned} \quad (\text{F.12})$$

Aplicamos el cambio de variables  $y = \cos u$ :

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2 u}{1 - \cos^2 \theta \cos^2 u} du &= \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-y^2}}{1 - a^2 y^2} dy \\ &= \frac{\pi}{a^2} \left( 1 - \sqrt{1-a^2} \right) \end{aligned}$$

donde  $a \equiv \cos \theta$ . El último pasaje se obtiene de tablas. Finalmente

$$e_{exc} = -\delta + \frac{\delta k^2}{2\Delta} (1 - \text{sen} \theta). \quad (\text{F.13})$$

Reemplazando las Ecs.(F.6), (F.9) y (F.13) en la Ec.(5.12) obtenemos la energía total:

$$e[\theta, \Delta, k, \delta, \eta] = \frac{\delta}{2\Delta} k^2 (1 - \text{sen} \theta) + \gamma \left( 1 - \frac{\Delta}{2} \right) \cos^2 \theta - \frac{\pi k}{2} G(\Delta) \cos^2 \theta \quad (\text{F.14})$$

donde  $\gamma = \pi^2/3 - \kappa$ . Si minimizamos la Ec. (F.14) con respecto a los parámetros variacionales  $(\theta, \Delta, k)$  obtenemos:

$$\frac{\delta k}{\Delta} (1 - \text{sen } \theta) = \frac{\pi}{2} G(\Delta) \cos^2 \theta \quad (\text{F.15})$$

$$\frac{\delta k^2}{\Delta^2} (1 - \text{sen } \theta) = - \left[ \gamma + \pi k \frac{dG}{d\Delta} \right] \cos^2 \theta \quad (\text{F.16})$$

$$\frac{\delta k^2}{2\Delta} \cos \theta = - \left[ 2\gamma \left( 1 - \frac{\Delta}{2} \right) - \pi k G(\Delta) \right] \text{sen } \theta \cos \theta \quad (\text{F.17})$$

Estas son algunas propiedades relevantes de este conjunto de ecuaciones:

- El estado saturado,  $\theta = 0$ , nunca es solución de las ecuaciones de arriba, excepto en el límite  $k \rightarrow 0$  (o  $\Delta \rightarrow 0$ ) que corresponde a  $\delta \rightarrow \infty$ . Este caso debe ser tratado por separado.
- El estado ferromagnético en el plano,  $\theta = \pi/2$ , es siempre solución del conjunto de ecuaciones, siendo por lo tanto, un mínimo -al menos local- dentro del régimen de validez de la Ec. (F.14).

Para  $\theta \neq \pi/2$ , las ecuaciones variacionales se reducen a

$$\frac{\delta k}{\Delta} = \frac{\pi}{2} G(\Delta)(1 + \text{sen } \theta) \quad (\text{F.18})$$

$$\frac{\delta k^2}{\Delta^2} = - \left[ \gamma + \pi k \frac{dG}{d\Delta} \right] (1 + \text{sen } \theta) \quad (\text{F.19})$$

$$\frac{\delta k^2}{2\Delta} = - \left[ 2\gamma \left( 1 - \frac{\Delta}{2} \right) - \pi k G(\Delta) \right] \text{sen } \theta \quad (\text{F.20})$$

que pueden ser resueltas numéricamente.

### Solución YG cerca de la transición de reorientación

En regiones cercanas a la reorientación, i.e., cerca del estado en el cual se pasa de  $\theta = 0$  a  $\theta \neq 0$  podemos aproximar  $\cos \theta = s \ll 1$  por lo que podemos hacer  $1 - \text{sen } \theta = 1 - \sqrt{1 - s^2} \sim s^2/2$ . Reemplazando en las Ecs.(F.15)-(F.17) obtenemos:

$$k = \frac{\pi\Delta}{\delta} G(\Delta) \quad (\text{F.21})$$

$$\frac{\delta k^2}{2\Delta^2} = - \left[ \gamma + \pi k \frac{dG}{d\Delta} \right] \quad (\text{F.22})$$

que son independientes de  $s$ . La Ec.(F.17) tiende a cero en el límite  $s \rightarrow 0$ . Reemplazando la Ec. (F.21) en (F.22) se encuentra

$$\frac{\kappa}{\pi^2} = \frac{1}{3} + \frac{G(\Delta)}{2\delta} \left[ G(\Delta) + 2\Delta \frac{dG}{d\Delta} \right]. \quad (\text{F.23})$$

En el Apéndice G demostramos que tanto  $G(\Delta)$  como la expresión entre corchetes de la Ec.(F.23) son funciones monotonamente decrecientes con  $\Delta$ . Ya que el máximo valor permitido es  $\Delta = 1$  (que corresponde a  $w = h$ . i.e., un perfil sinusoidal puro), el mínimo valor de  $\kappa = \kappa_{min}$

para el cual existe una solución de dominios corresponde a  $\Delta = 1$ . Valiéndonos de que  $G(1) = 1$  y  $(dG/d\Delta)_{\Delta=1} = -1$  encontramos

$$\kappa_{min} = \pi^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{2\delta} \right). \quad (\text{F.24})$$

De la Ec.(F.21) esto corresponde a  $k = \pi/\delta$  o  $h = \delta$ . Reemplazando estos valores en la Ec. (F.20) vemos que en el límite  $\kappa \rightarrow \kappa_{min}$  tenemos que  $\text{sen } \theta \rightarrow 1$ . De la Ec.(F.14) se puede ver que, en este límite, el estado ferromagnético en el plano y las soluciones de dominios son degeneradas. Este punto corresponde a la transición de reorientación y está dada, en el espacio  $(\eta, \delta)$  por:

$$\eta_{SRT}(\delta) = \frac{\pi^2}{3} + 3g - (c_2 - c_1) - \frac{\pi^2}{2\delta} = 6,775.. - \frac{\pi^2}{2\delta} \quad (\text{F.25})$$

Ahora mencionamos brevemente como son las soluciones cerca de la reorientación, donde  $\kappa = \kappa_{min} + \epsilon$ , con  $\epsilon \ll 1$ . Expandiendo la Ec.(F.23) hasta el primer orden en  $t \equiv \Delta - 1$  obtenemos  $t = -\frac{1}{\pi^2} \frac{6\delta}{\pi^2 - 6} \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2)$ . Haciendo uso de la expansión de  $G(\Delta)$

$$G(\Delta) = 1 - t + \left( 1 - \frac{\pi^2}{12} \right) t^2 + \frac{\alpha}{6} t^3 + \mathcal{O}(t^4)$$

(ver Apéndice G) y aplicando las Ecs. (F.21) y (F.17) en la Ec. (F.14) encontramos, luego de un poco de álgebra:

$$e = -2\delta\epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (\text{F.26})$$

lo cual confirma que la solución de dominios tiene menor energía que el orden ferromagnético en el plano.



# Apéndice G

## Comportamientos asintóticos de la función $G(\Delta)$

### Límite de $\Delta \rightarrow 1$

El cálculo que presentamos a continuación es válido en el límite de  $h \gg 1$ . Si aplicamos este límite a la Ec. (F.2) todos los coeficientes  $b_m$  se anulan a excepción de  $m = 1$ :

$$b_1 = \frac{4 \cos\left(\frac{\pi\Delta}{2}\right)}{\pi(1-\Delta^2)} \rightarrow 1 \quad (\text{G.1})$$

$$\frac{db_1}{d\Delta} = \frac{4 - \frac{\pi}{2}(1-\Delta^2) \sin\left(\frac{\pi\Delta}{2}\right) + 2\Delta \cos\left(\frac{\pi\Delta}{2}\right)}{\pi(1-\Delta^2)^2} \rightarrow -\frac{1}{2} \quad (\text{G.2})$$

donde hemos usado la regla de L'Hopital. También tenemos que:

$$\frac{db_m}{d\Delta} = \frac{4(-1)^{(m-1)/2} - \frac{m\pi}{2}(1-m^2\Delta^2) \sin\left(\frac{m\pi\Delta}{2}\right) + 2m^2\Delta \cos\left(\frac{m\pi\Delta}{2}\right)}{m\pi(1-m^2\Delta^2)^2} \rightarrow -\frac{2}{1-m^2} \text{ para } m > 1 \quad (\text{G.3})$$

Por lo tanto,  $G(1) = 1$  y

$$\left(\frac{dG}{d\Delta}\right)_{\Delta=1} = \lim_{\Delta \rightarrow 1} 2 \sum_m m b_m \frac{db_m}{d\Delta} = -1 \quad (\text{G.4})$$

Con la ayuda de *Mathematica*, podemos evaluar exactamente:

$$\lim_{\Delta \rightarrow 1} \frac{d^2 b_1}{d\Delta^2} = \frac{1}{12} (6 - \pi^2) \quad (\text{G.5})$$

$$\lim_{\Delta \rightarrow 1} \frac{d^3 b_1}{d\Delta^3} = -\frac{1}{8} (6 - \pi^2) \quad (\text{G.6})$$

$$\lim_{\Delta \rightarrow 1} \frac{d^2 b_m}{d\Delta^2} = -\frac{8m^2}{(1-m^2)^2} \text{ para } m > 1 \quad (\text{G.7})$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d^2G}{d\Delta^2}\right)_{\Delta=1} &= \lim_{\Delta \rightarrow 1} 2 \sum_m m \left[ b_m \frac{d^2b_m}{d\Delta^2} + \left(\frac{db_m}{d\Delta}\right)^2 \right] \\
&= \frac{3}{2} - \frac{\pi^2}{6} + 8 \sum_{m=3,5,\dots} \frac{m}{(1-m^2)^2} \\
&= \frac{3}{2} - \frac{\pi^2}{6} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k+1)}{k^2(k+1)^2}
\end{aligned} \tag{G.8}$$

y

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d^3G}{d\Delta^3}\right)_{\Delta=1} &= \lim_{\Delta \rightarrow 1} 2 \sum_m m \left[ b_m \frac{d^3b_m}{d\Delta^3} + 3 \frac{db_m}{d\Delta} \frac{d^2b_m}{d\Delta^2} \right] \\
&= \lim_{\Delta \rightarrow 1} \left[ 2b_1 \frac{d^3b_1}{d\Delta^3} + 6 \frac{db_1}{d\Delta} \frac{d^2b_1}{d\Delta^2} + 6 \sum_{m=3,5,\dots} m \frac{db_m}{d\Delta} \frac{d^2b_m}{d\Delta^2} \right] \\
&= -\frac{1}{2}(6 - \pi^2) - \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k+1)^3}{k^3(k+1)^3}
\end{aligned} \tag{G.9}$$

donde hemos asumido que  $h \gg 1$  y tomado el límite superior de las sumas igual a  $\infty$ . De tablas:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k+1)}{k^2(k+1)^2} &= 1 \\
\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k+1)^3}{k^3(k+1)^3} &= 2(1 + \zeta(3)) = 2(1 + g)
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\left(\frac{d^2G}{d\Delta^2}\right)_{\Delta=1} = 2 - \frac{\pi^2}{6} \tag{G.10}$$

$$\left(\frac{d^3G}{d\Delta^3}\right)_{\Delta=1} = \alpha = -6 + \frac{\pi^2}{2} - 3g \approx -4,67137 \tag{G.11}$$

Por ende, cerca de  $\Delta = 1$  tenemos el siguiente desarrollo asintótico:

$$G(\Delta) = 1 - (\Delta - 1) + \left(1 - \frac{\pi^2}{12}\right) (\Delta - 1)^2 + \frac{\alpha}{6} (\Delta - 1)^3 + \mathcal{O}(\Delta^4) \tag{G.12}$$

## Límite de $\Delta \ll 1$

En este límite tenemos:

$$G(\Delta) = \frac{16}{\pi^2} \sum_{m=1,3,\dots} \frac{1}{m} \frac{1}{(1-m^2\Delta^2)^2} \cos^2\left(\frac{m\pi\Delta}{2}\right) \tag{G.13}$$

$$\sim \frac{8}{\pi^2} \int_{\Delta}^{\infty} \frac{\cos^2\left(\frac{\pi x}{2}\right)}{x(1-x^2)^2} \tag{G.14}$$

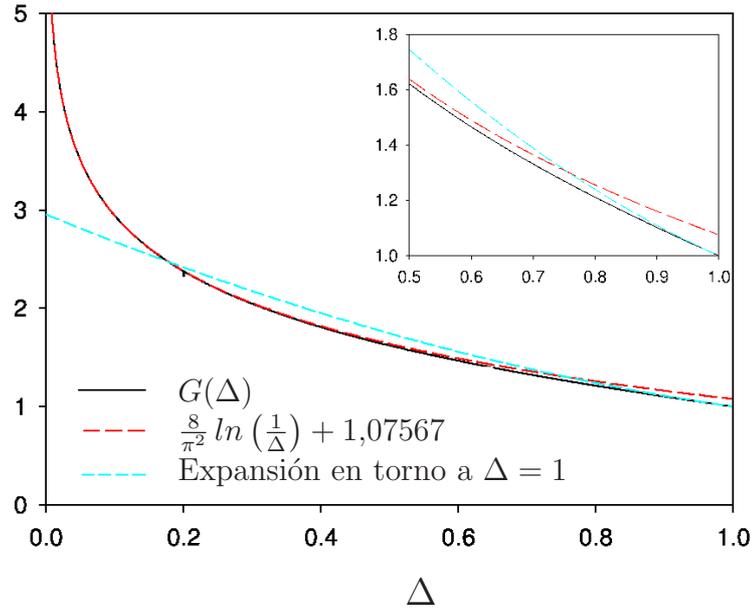


Figura G.1: Función  $G(\Delta)$  obtenida de la sumando en forma numérica la Ec. (F.10) y usando dos aproximaciones, ver Inset.

el integrando es un producto de  $1/x$  por una función que decae rápidamente para valores grandes de  $x$ . Por lo tanto, la integral puede ser aproximada reemplazando el límite superior de integración por un valor finito. Con esto, podemos expandir la función que acompaña al término  $1/x$  en torno a cero. De esta manera obtenemos:

$$G(\Delta) \sim \frac{8}{\pi^2} \ln\left(\frac{1}{\Delta}\right) \quad (\text{G.15})$$

En la Ref.[38], mediante un procedimiento que desconocemos, se obtiene la expresión:

$$G(\Delta) \approx \frac{8}{\pi^2} \ln\left(\frac{6\pi}{5\Delta}\right) = \frac{8}{\pi^2} \ln\left(\frac{1}{\Delta}\right) + 1,07567 \quad (\text{G.16})$$

Como se puede ver en la Fig. G.1 esta expresión aproxima muy bien a la función  $G(\Delta)$  para  $\Delta < 0,7$ .



## Apéndice H

# Energía de perfiles de magnetización con pared hiperbólica (PH)

Consideremos el PH de Ec. (5.19). Calcularemos en esta sección las diferentes contribuciones a la energía a partir de la Ec. (5.12).

### Término de anisotropía

Ésta puede ser calculada directamente, quedando de la forma:

$$\begin{aligned} e_{an} &= -\frac{\kappa}{L} \sum_{x=1} [M^z(x)]^2 \\ &= -\kappa M_0^2 \left[ 1 - \frac{2}{h_r} \operatorname{tgh} \left( \frac{h_r}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{H.1})$$

donde  $h_r = h/l_w$ . En el límite  $h_r \gg 1$ , obtenemos:

$$e_{an} = -\kappa M_0^2 \left[ 1 - \frac{2}{h_r} \right]. \quad (\text{H.2})$$

### Término de intercambio

De la Ec. (F.11) sabemos que:

$$e_{ex} \sim -\delta + \frac{\delta}{h} \sum_x^{h/2} \left[ \frac{d\phi(x)}{dx} \right]^2. \quad (\text{H.3})$$

Como

$$\cos(\phi(x)) = M_0 \operatorname{tgh} \left( \frac{x}{l_w} \right),$$

entonces

$$\left[ \frac{d\phi(x)}{dx} \right]^2 = \frac{1}{l_w^2} \frac{\operatorname{sech}^4 \left( \frac{x}{l_w} \right)}{M_0^{-2} - \operatorname{tgh}^2 \left( \frac{x}{l_w} \right)} \quad (\text{H.4})$$

$$\begin{aligned}
e_{ex} &= -\delta + \frac{\delta}{h} \sum_{x=1}^{h/2} \frac{1}{l_w^2} \frac{\operatorname{sech}^4\left(\frac{x}{l_w}\right)}{M_0^{-2} - \operatorname{tgh}^2\left(\frac{x}{l_w}\right)} \\
&= -\delta + \frac{\delta}{hl_w} \int_0^{\frac{h}{2l_w}} \frac{\operatorname{sech}^4(u)}{M_0^{-2} - \operatorname{tgh}^2(u)} du \\
&= -\delta \left[ 1 - \frac{1}{h_r l_w^2} \left( \frac{M_0^2 - 1}{M_0} \operatorname{tgh}^{-1} \left( M_0 \operatorname{tgh} \left( \frac{h_r}{2} \right) \right) + \operatorname{tgh} \left( \frac{h_r}{2} \right) \right) \right]. \quad (\text{H.5})
\end{aligned}$$

En la fase de fajas saturadas  $M_0 = 1$ , por lo tanto

$$e_{ex} = -\delta \left[ 1 - \frac{1}{h_r l_w^2} \operatorname{tgh} \left( \frac{h_r}{2} \right) \right] \quad (\text{H.6})$$

En el límite  $h_r \gg 1$  obtenemos:

$$e_{exc} = -\delta M_0^2 \left[ 1 - \frac{1}{h_r l_w^2} \right]. \quad (\text{H.7})$$

## Término dipolar

### Solución numérica

En primer lugar realizamos la siguiente aproximación sobre la función  $\operatorname{tgh}(x)$ :

$$\operatorname{tgh}(x) = \begin{cases} x \left( 1 - \frac{x^3}{3} \right) & \text{si } 0 \leq x \leq \frac{1}{2} \\ (1 - e^{-2x})^2 (1 + e^{-4x}) & \text{si } \frac{1}{2} \leq x \leq \frac{h}{2} \end{cases} \quad (\text{H.8})$$

Luego, los coeficientes de *Fourier*  $b_m$  pueden ser expresados de la forma  $b_m = b_m^1 + b_m^2$ , donde

$$b_m^1 = \frac{4}{h} \int_0^{\frac{x}{2}} x \left( 1 - \frac{x^3}{3} \right) \sin \left( \frac{m\pi x}{h} \right) dx \quad \text{y} \quad (\text{H.9})$$

$$b_m^2 = \frac{4}{h} \int_{\frac{x}{2}}^{\frac{h}{2}} (1 - e^{-2x})^2 (1 + e^{-4x}) \sin \left( \frac{m\pi x}{h} \right) dx \quad (\text{H.10})$$

ambas integrales tienen solución analítica. Como esta expresión es demasiado larga debe ser manipulada con programas especiales (*Mathematica*) y no es incluida en este texto.

### Aproximación de la energía dipolar

En este caso usamos el término dipolar obtenido de la aproximación YG (ver discusión de la Sec. 5.3). Sólo hay que tener en cuenta que la longitud de pared  $w$  y  $l_w$  en uno y otro caso tienen diferentes significados. Para ello definimos un coeficiente de ajuste  $f$  de la forma  $l_w = fw$  cuyo valor oscila en torno a 3 – 4. En el límite de  $h \gg 1$  tenemos:

$$e_{dip} = M_0^2 \left[ \pi^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{f}{6h_r} \right) - \frac{4}{h_r l_w} \ln \left( \frac{6\pi h_r}{5f} \right) \right]. \quad (\text{H.11})$$

Minimizando la energía total sobre las variables  $l_w$  y  $h_r$  obtenemos el siguiente desarrollo asintótico del ancho de fajas en función de  $\delta$  y  $\kappa$ :

$$h = \frac{5f}{6\pi} l_w \exp \left[ \frac{\delta}{2l_w} \right] \quad (\text{H.12})$$

donde

$$l_w = \frac{\delta}{2 + \sqrt{4 + (2\kappa - f\pi^2/6)\delta}}. \quad (\text{H.13})$$

De la Ec. (H.13), calculamos la siguiente relación entre  $\eta$  y  $\delta$ :

$$\eta = \frac{1}{2l_w^2} \delta - \frac{2}{l_w} + \frac{f\pi^2}{12} + 3g - 2(c_2 - c_1), \quad (\text{H.14})$$

que permite establecer la línea de transición entre las fases saturada e *Ising*. Para ello es necesario fijar un criterio para el mínimo valor del parámetro  $f$ . Eligiendo  $f = 4$  podemos extrapolar los valores de  $h$  obtenidos de los cálculos MC a valores pequeños de  $\delta$ . En el límite continuo, el mínimo valor permitido a  $l_w$  es uno. Por eso es natural elegir  $l_w = 1$  para obtener el límite *Ising* a través de la Ec. (H.14). Por otro lado, con esta elección de  $l_w$  y  $f$ , la Ec. (H.12) es aproximadamente igual a la obtenida en el límite de altas anisotropías.



# Bibliografía

- [1] S. A. Pighín y S. A. Cannas, “Phase diagram of an Ising model for ultrathin magnetic films: Comparing mean field and monte carlo predictions,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, nro. 22, pág. 224433, 2007.
- [2] S. A. Pighín, O. V. Billoni, D. Stariolo, y S. A. Cannas, “Domain walls, canted states and stripe width variation in ultrathin magnetic films with perpendicular anisotropy.” sometido para publicación.
- [3] M. Carubelli, O. V. Billoni, S. A. Pighín, S. A. Cannas, D. A. Stariolo, y F. A. Tamarit, “Spin reorientation transition and phase diagram of ultrathin ferromagnetic films,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, nro. 13, pág. 134417, 2008.
- [4] S. A. Pighín, O. V. Billoni, D. Stariolo, y S. A. Cannas, “Stripe width variation at finite temperature in a 2d Heisenberg model with dipolar interactions.” en preparación.
- [5] R. Allenspach y A. Bischof, “Magnetization direction switching in fe/cu (100) epitaxial films: temperature and thickness dependence,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 69, págs. 3385–3388, 1992.
- [6] P. Molho, J. L. Porteseil, Y. Souche, J. Gouzerh, y J. C. S. Levy, “Irreversible evolution in the topology of magnetic domains (invited),” *J. of Appl. Phys.*, vol. 61, nro. 8, págs. 4188–4193, 1987.
- [7] M. Seul y R. Wolfe, “Evolution of disorder in magnetic stripe domains. i. transverse instabilities and disclination unbinding in lamellar patterns,” *Phys. Rev. A*, vol. 46, nro. 12, págs. 7519–7533, 1992.
- [8] M. Seul y R. Wolfe, “Evolution of disorder in magnetic stripe domains. ii. hairpins and labyrinth patterns versus branches and comb patterns formed by growing minority component,” *Phys. Rev. A*, vol. 46, nro. 12, págs. 7534–7547, 1992.
- [9] R. P. Huebener, *Magnetic flux structures in superconductors*. Springer-Verlag, 2nd ed., 2001.
- [10] M. Seul y M. J. Sammon, “Competing interactions and domain-shape instabilities in a monomolecular film at an air-water interface,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 64, nro. 16, págs. 1903–1906, 1990.
- [11] M. Seul y V. S. Chen, “Isotropic and aligned stripe phases in a monomolecular organic films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, pág. 1658, 1993.
- [12] H. McConnell, “Structures and transitions in lipid monolayers at the air-water interface,” *Annu. Rev. Phys. Chem.*, vol. 42, pág. 171, 1991.

- [13] Q. Ouyang y J. M. Flesselles, "Transition from spirals to defect turbulence driven by a convective instability," *Nature*, vol. 379, pág. 143, 1996.
- [14] R. M. Weis y H. M. McConnell, "Two-dimensional chiral crystals of phospholipid," *Nature*, vol. 310, pág. 47, 1984.
- [15] M. Seul y D. Andelman, "Domain shapes and patterns: the phenomenology of modulated phases," *Science*, vol. 267, págs. 476–483, 1995.
- [16] M. R. Freeman y B. C. Choi, "Advances in Magnetic Microscopy," *Science*, vol. 294, nro. 5546, págs. 1484–1488, 2001.
- [17] R. J. Celotta y D. T. Pierce, "Polarized Electron Probes of Magnetic Surfaces," *Science*, vol. 234, nro. 4774, págs. 333–340, 1986.
- [18] D. P. Pappas, K.-P. Kämper, B. P. Miller, H. Hopster, D. E. Fowler, A. C. Luntz, C. R. Brundle, y Z.-X. Shen, "Magnetism of ultrathin films of fe on cu(100)," *J.Appl.Phys.*, vol. 69, nro. 8, págs. 5209–5211, 1991.
- [19] J. Giergiel, J. Shen, J. Woltersdorf, A. Kirilyuk, y J. Kirschner, "Growth and morphology of ultrathin fe films on cu(001)," *Phys. Rev. B*, vol. 52, nro. 11, págs. 8528–8534, 1995.
- [20] A. Hubert y R. Schäfer, *Magnetic Domains*. Springer-Verlag, 1st ed., 2000.
- [21] O. Portmann, *Micromagnetism in the Ultrathin Limit*. Logos Verlag, 2006.
- [22] <http://www.research.ibm.com/journal/rd/444/allenspach.html>.
- [23] M. R. Scheinfein, J. Unguris, M. H. Kelley, D. T. Pierce, y R. J. Celotta, "Scanning electron microscopy with polarization analysis (SEMPA)," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 61, nro. 10, págs. 2501–2527, 1990.
- [24] W. A. Jesser y J. W. Matthews, "Evidence for pseudomorphic growth of iron on copper," *Phil. Mag.*, vol. 15, pág. 1097, 1967.
- [25] V.L.Moruzzi, P.M.Marcus, y J. Kübler, "Magnetovolume instabilities and ferromagnetism versus antiferromagnetism in bulk fcc iron and manganese," *Phys. Rev. B*, vol. 39, págs. 6957–6961, 1989.
- [26] M. L. Néel, "Anisotropie magnétique superficielle et surstructures d'orientation," *J. Phys. Rad.*, vol. 15, pág. 225, 1954.
- [27] J. G. Gay y R. Richter, "Spin anisotropy of ferromagnetic films," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, nro. 25, págs. 2728–2731, 1986.
- [28] D. Pescia, M. Stampanoni, G. L. Bona, A. Vaterlaus, R. F. Willis, y F. Meier, "Magnetism of epitaxial fcc iron films on cu(001) investigated by spin-polarized photoelectron emission," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, nro. 20, págs. 2126–2129, 1987.
- [29] C. Liu, E. R. Moog, y S. D. Bader, "Polar kerr-effect observation of perpendicular surface anisotropy for ultrathin fcc fe grown on cu(100)," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 60, nro. 23, págs. 2422–2425, 1988.

- [30] Z. Q. Qiu, J. Pearson, y S. D. Bader, “Asymmetry of the spin reorientation transition in ultrathin Fe films and wedges grown on Ag(100),” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, nro. 7, págs. 1006–1009, 1993.
- [31] A. Berger y H. Hopster, “Nonequilibrium magnetization near the reorientation phase transition of Fe/Ag(100) films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, págs. 519–522, 1996.
- [32] C. Sommers, J. Zabloudil, C. Uiberacker, P. Weinberger, y L. Szunyogh, “Multiple reorientation transition of the magnetization of free surfaces of Fe on Ag(100),” *Phys. Rev. B*, vol. 58, nro. 9, págs. 5539–5543, 1998.
- [33] A. Kukunin, J. Prokop, y H. J. Elmers, “Temperature-driven spin reorientation transition in Fe/Mo(110) nanostructures,” *Phys. Rev. B*, vol. 76, nro. 13, pág. 134414, 2007.
- [34] R. Allenspach, M. Stampanoni, y A. Bischof, “Magnetic domains in thin epitaxial Co/Au(111) films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, págs. 3344–3347, 1990.
- [35] S. Pütter, H. F. Ding, Y. T. Millev, H. P. Oepen, y J. Kirschner, “Magnetic susceptibility: An easy approach to the spin-reorientation transition,” *Phys. Rev. B*, vol. 64, nro. 9, pág. 092409, 2001.
- [36] F. E. Gabaly, S. Gallego, C. Muñoz, L. Szunyogh, P. Weinberger, C. Klein, A. K. Schmid, K. F. McCarty, y J. de la Figuera, “Imaging spin-reorientation transitions in consecutive atomic Co layers on Ru(0001),” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, nro. 14, pág. 147202, 2006.
- [37] F. Baudalet, M.-T. Lin, W. Kuch, K. Meinel, B. Choi, C. M. Schneider, y J. Kirschner, “Perpendicular anisotropy and spin reorientation in epitaxial Fe/Cu<sub>3</sub>Au(100) thin films,” *Phys. Rev. B*, vol. 51, nro. 18, págs. 12563–12578, 1995.
- [38] Y. Z. Wu, C. Won, A. Scholl, A. Doran, H. W. Zhao, X. F. Jin, y Z. Q. Qiu, “Magnetic stripe domains in coupled magnetic sandwiches,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, pág. 117205, 2004.
- [39] C. S. Arnold, H. L. Johnston, y D. Venus, “Magnetic susceptibility measurements near the multicritical point of the spin-reorientation transition in ultrathin fcc Fe(111)/2 ml Ni/W(110) films,” *Phys. Rev. B*, vol. 56, nro. 13, págs. 8169–8174, 1997.
- [40] D. Venus, C. S. Arnold, y M. Dunlavy, “Domains in perpendicularly magnetized ultrathin films studied using the magnetic susceptibility,” *Phys. Rev. B*, vol. 60, nro. 13, págs. 9607–9615, 1999.
- [41] M. Coisson, F. Celegato, E. Olivetti, P. Tiberto, F. Vinai, y M. Baricco, “Stripe domains and spin reorientation transition in Fe<sub>78</sub>B<sub>13</sub>Si<sub>9</sub> thin films produced by rf sputtering,” *J. of Appl. Phys.*, vol. 104, nro. 3, pág. 033902, 2008.
- [42] A. Vaterlaus, C. Stamm, U. Maier, M. G. Pini, P. Politi, y D. Pescia, “Two-step disordering of perpendicularly magnetized ultrathin films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, págs. 2247–2250, 2000.
- [43] D. P. Pappas, K. P. Kamper, y H. Hopster, “Reversible transition between perpendicular and in-plane magnetization in ultrathin films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 64, págs. 3179–3182, 1990.

- [44] D. P. Pappas, C. R. Brundle, y H. Hopster, “Reduction of macroscopic moment in ultrathin fe films as the magnetic orientation changes,” *Phys. Rev. B*, vol. 45, nro. 14, págs. 8169–8172, 1992.
- [45] C. Won, Y. Z. Wu, W. Kim, A. Doran, T. Owens, J. Wu, X. F. Jin, H. W. Zhao, y Z. Q. Qiu, “Magnetic stripe melting at the spin reorientation transition in Fe/Ni/Cu(001),” *Phys. Rev. B*, vol. 71, pág. 224429, 2005.
- [46] O. Portmann, A. Vaterlaus, y D. Pescia, “An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films,” *Nature*, vol. 422, págs. 701–704, 2003.
- [47] O. Portmann, A. Vaterlaus, y D. Pescia, “Observation of stripe mobility in a dipolar frustrated ferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, pág. 047212, 2006.
- [48] R. Czech y J. Villain, “Instability of two-dimesional Ising ferromagnets with dipole interactions,” *J. Phys. : Condensed Matter*, vol. 1, págs. 619–627, 1989.
- [49] A. B. Kashuba y V. L. Pokrovsky, “Stripe domian structures in a thin ferromagnetic film,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, págs. 3155–3158, 1993.
- [50] A. Vindigni, O. Portmann, N. Saratz, F. Cinti, P. Politi, y D. Pescia, *Temperature-Induced Domain Shrinking in Ising Ferromagnets Frustrated by a Long-Range Interaction*, vol. 4, págs. 783–786. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [51] Y. Yafet y E. M. Gyorgy, “Ferromagnetic strip domains in an atomic monolayer,” *Phys. Rev. B*, vol. 38, nro. 13, págs. 9145–9151, 1988.
- [52] A. Abanov, V. Kalatsky, V. L. Pokrovsky, y W. M. Saslow, “Phase diagram of ultrathin ferromagnetic films with perpendicular anisotropy,” *Phys. Rev. B*, vol. 51, págs. 1023–1038, 1995.
- [53] I. Booth, A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, y K. De’Bell, “Domain structures in ultrathin magnetic films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, págs. 950–953, 1995.
- [54] J. Choi, J. Wu, C. Won, Y. Z. Wu, A. Scholl, A. Doran, T. Owens, y Z. Q. Qiu, “Magnetic bubble domain phase at the spin reorientation transition of ultrathin fe/ni/cu(001) film,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, nro. 20, pág. 207205, 2007.
- [55] T. Garel y S. Doniach, “Phase transitions with spontaneous modulation-the dipolar Ising ferromagnet,” *Phys. Rev. B*, vol. 26, págs. 325–329, 1982.
- [56] P. Politi, “Domain structures in ultrathin magnetic films,” *Comments Cond. Matter Phys.*, vol. 18, págs. 191–221, 1998.
- [57] B. Kaplan y G. Gehring, “The domain structure in ultrathin magnetic films,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 128, págs. 111–116, 1993.
- [58] A. B. Kashuba y V. L. Pokrovsky, “Stripe domian structures in a thin ferromagnetic film,” *Phys. Rev. B*, vol. 48, págs. 10335–10344, 1993.

- [59] La definición del *Hamiltoniano* dada por estos autores es distinta a la utilizada por nosotros. Para ellos, la interacción dipolar contiene la suma de los pares de espines dos veces, mientras que nosotros los contamos una sola vez. Al reescalar por  $g$ , todas sus variables son el doble que las nuestras. Esto incluye a la temperatura, porque la energía también queda dividida por un factor 2.
- [60] A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, M. C. Robinson, y K. De'Bell, "Striped phases in two-dimensional dipolar ferromagnets," *Phys. Rev. B*, vol. 51, pág. 16033, 1995.
- [61] G. Bertotti, *Hysteresis in magnetism*. Academic Press, 1998.
- [62] A. B. MacIsaac, K. De'Bell, y J. P. Whitehead, "Simulation of the reorientation transition in ultrathin magnetic films with striped and tetragonal phases," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, págs. 616–619, 1995.
- [63] K. De'Bell, A. B. MacIsaac, I. N. Booth, y J. P. Whitehead, "Dipolar-induced planar anisotropy in ultrathin magnetic films," *Phys. Rev. B*, vol. 55, nro. 22, págs. 15108–15118, 1997.
- [64] J. P. Whitehead, A. B. MacIsaac, y K. De'Bell, "Canted stripe phase near the spin reorientation transition in ultrathin magnetic films," *Phys. Rev. B*, vol. 77, nro. 17, pág. 174415, 2008.
- [65] A. Vindigni, N. Saratz, O. Portmann, D. Pescia, y P. Politi, "Stripe width and nonlocal domain walls in the two-dimensional dipolar frustrated Ising ferromagnet," *Phys. Rev. B*, vol. 77, nro. 9, pág. 092414, 2008.
- [66] M. Grousson, G. Tarjus, y P. Viot, "Phase diagram of an Ising model with long-range frustrating interactions: A theoretical analysis," *Phys. Rev. E*, vol. 62, págs. 7781–7792, 2000.
- [67] P. M. Gleiser, F. A. Tamarit, y S. A. Cannas, "Metastable states in ultrathin magnetic films," *Physica D*, vol. 168-169, pág. 73, 2002.
- [68] S. A. Cannas, D. A. Stariolo, y F. A. Tamarit, "Stripe-tetragonal first order phase transition in ultrathin magnetic film," *Phys. Rev. B*, vol. 69, pág. 092409, 2004.
- [69] M. Casartelli, L. Dall'Asta, E. Rastelli, y S. Regina, "Metric features of a dipolar model," *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 37, págs. 11731–11749, 2004.
- [70] E. Rastelli, S. Regina, y A. Tassi, "Phase transitions in a square Ising model with exchange and dipole interactions," *Phys. Rev. B*, vol. 73, pág. 144418, 2006.
- [71] A. Moshel y K. D. Usadel, "Reorientation transitions of first and second order in thin ferromagnetic films," *Phys. Rev. B*, vol. 51, págs. 16111–16114, 1995.
- [72] S. A. Cannas, P. M. Gleiser, y F. A. Tamarit, *Two dimensional Ising model with long-range competing interactions*, vol. 5 (II) of *Recent Research Developments in Physics*, págs. 751–780. Transworld Research Network, India, 2004.
- [73] K. De'Bell, A. B. MacIsaac, y J. P. Whitehead, "Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 72, págs. 225–257, 2000.

- [74] D. Pescia y V. L. Pokrovsky, “Perpendicular versus in-plane magnetization in a 2d Heisenberg monolayer at finite temperatures,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, nro. 20, págs. 2599–2601, 1990.
- [75] P. Politi, A. Rettori, y M. G. Pini, “Comment on “perpendicular versus in-plane magnetization in a 2d Heisenberg monolayer at finite temperatures”,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, nro. 8, pág. 1183, 1993.
- [76] L. Nicolao y D. A. Stariolo, “Langevin simulations of a model for ultrathin magnetic films,” *Phys. Rev. B*, vol. 76, nro. 5, pág. 054453, 2007.
- [77] D. G. Barci y D. A. Stariolo, “Competing interactions, the renormalization group, and the isotropic-nematic phase transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, nro. 20, pág. 200604, 2007.
- [78] P. M. Chaikin y T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 1ra ed., 1995.
- [79] W. Selke y M. Fisher, “Monte carlo study of the spatially modulated phase in an Ising model,” *Phys. Rev. B*, vol. 20, nro. 1, págs. 257–265, 1979.
- [80] N. Goldenfeld, *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. Addison-Wesley, 1992.
- [81] S. A. Cannas, M. F. Michelon, D. A. Stariolo, y F. A. Tamarit, “Ising nematic phase in ultra-thin magnetic films: a monte carlo study,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, pág. 184425, 2006.
- [82] D. P. Landau y K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in Statistical Physics*. Cambridge, 1ra ed., 2000.
- [83] P. M. Gleiser, F. A. Tamarit, S. A. Cannas, y M. A. Montemurro, “Slow dynamics in an ultra-thin magnetic film model,” *Phys. Rev. B*, vol. 68, pág. 134401, 2003.
- [84] R. Kretschmer y K. Binder, “Ordering and phase transitions in ising systems with competing short range and dipolar interactions,” *Z. Phys. B*, vol. 34, págs. 375–392, 1979.
- [85] M. P. Allen y D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 1987.
- [86] D. Frenkel y B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, 1996.
- [87] G.A.Gehring y M.Keskin, “The temperature dependence of the domain spacing in ultrathin magnetic films,” *J.Phys.: Condens. Matter*, vol. 5, pág. L581, 1993.
- [88] Simulaciones de Monte Carlo para valores de  $\delta = 7$  y tamaño  $L = 116$  no muestran variación del ancho de faja con la temperatura. A. Vindigni, S. A. Cannas, comunicación privada.
- [89] I. S. Gradshteyn y I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press, 5ta ed., 1994.
- [90] A. Enders, D. Peterka, D. Repetto, N. Lin, A. Dmitriev, y K. Kern, “Temperature dependence of the surface anisotropy of fe ultrathin films on cu(001),” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, nro. 21, pág. 217203, 2003.

- [91] C. Won, Y. Z. Wu, J. Choi, W. Kim, A. Scholl, A. Doran, T. Owens, J. Wu, X. F. Jin, H. W. Zhao, y Z. Q. Qiu, "Magnetic stripe melting at the spin reorientation transition in Fe/Ni/Cu (001)," *Phys. Rev. B*, vol. 71, nro. 22, pág. 224429, 2005.
- [92] M. Carubelli, *Propiedades dinámicas y termodinámicas de modelos magnéticos con interacciones competitivas*. Tesis doctoral, Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba, 2009.
- [93] Comunicación privada.
- [94] M. Seul y R. Wolfe, "Evolution of disorder in two-dimensional stripe patterns: "smectic" instabilities and disclination unbinding," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, nro. 16, págs. 2460–2463, 1992.
- [95] A. Weber, E. Bodenschatz, y L. Kramer, "Defects in continuous media," *Adv.Mater.*, vol. 3, nro. 4, 1991.