Efecto de las Fluctuaciones Cuánticas en Fases Topológicas No Triviales de la Red Triangular Antiferromagnética

Autor: Martín Tomé Director: Prof. Dr. Hector Diego Rosales

Trabajo de Diploma prensentado para obtener el grado de Licenciado en Física



Departamento de Física Universidad Nacional de La Plata La Plata, Argentina 2019

Agradecimientos

Quisiera agradecer:

A Dani, por todas las risas y buenos momentos compartidos.

A mi familia, en especial a mi madre, por su apoyo incondicional.

A la familia Senra, mi segunda familia, por su apoyo y cariño.

A mis viejos amigos de toda la vida, que incluso a la distancia siempre me tuvieron en cuenta.

A todos los nuevos amigos que hice durante estos años de carrera, tanto dentro como fuera de la facultad.

A Diego, mi director, por su excelente dirección y buena predisposición a atender todas mis consultas.

Este trabajo fue realizado dentro del marco de una Beca de Estímulo a las Vocaciones Científicas, otorgada por el Consejo Interuniversitario Nacional.

Resúmen

En este trabajo estudiamos la estabilidad frente a fluctuaciones cuánticas de fases de Skyrmiones magnéticos en sistemas bidimensionales. Para ello, hacemos uso de métodos numéricos para determinar las configuraciones de mínima energía de los sistemas estudiados y de la teoría de ondas de spin en la aproximación lineal para estudiar el efecto de las fluctuaciones cuánticas sobre estas configuraciones.

Encontramos que en los sistemas ferromagnéticos estudiados (red cuadrada y red triangular) el efecto de las fluctuaciones cuánticas es despreciable incluso para el límite de fluctuaciones fuertes, s = 1/2. Sin embargo, el comportamiento de la distribución bosónica espacial, tanto del estado fundamental, como de los estados excitados, presentan propiedades muy interesantes.

Para el caso de la red triangular antiferromagnética encontramos que una descripción usando la teoría lineal de ondas de spin es insuficiente en algunos casos, en particular el caso s = 1/2 donde se sospecha que el sistema adopta una configuración desordenada sin análogo clásico.

ÍNDICE GENERAL

1	Introducción						
	1.1	1.1Motivación					
	1.2						
		1.2.1 Interacción de Intercambio	2				
		1.2.2 Interacción de Dzyaloshinsky-Moriya	3				
		1.2.3 Interacción con un Campo Magnético	4				
	1.3	Ondas de Espín					
		1.3.1 Representación de Holstein-Primakoff	5				
	1.4	miones					
		1.4.1 Origen del Skyrmion	8				
2	CLARNIC DN CLEADING MACNÉTICOS						
2	0 1	Tooría de Cuinghung Landau para Magnetos Quinalas	11				
	$\frac{2.1}{2.2}$	Summienes come Colución Estable en un Compo Magnético	11				
	2.2	Skyrmones como Solución Estable en un Campo Magnetico	15				
	2.3	rases de Multiples Espirales	10				
3	TEC	dría Lineal de Ondas de Espín	17				
	3.1	Caso General \mathcal{H}_{HDMZ}	17				
	3.2	Valores de Expectación	22				
4	Mo	delos Estudiados	25				
	4.1	Red Cuadrada Ferromagnética	26				
	4.2	Red Triangular Ferromagnética	29				
	4.3	Red Triangular Antiferromagnética	33				
5	Conclusiones						
Bibliografía							

1 Introducción

En este capítulo introducimos al lector al trabajo realizado en esta tesis de grado. Damos una motivación inicial para el estudio del efecto de las fluctuaciones cuánticas sobre excitaciones topológicas en sistemas magnéticos, seguido de una breve reseña de los temas en los que esta tesis está fundamentada.

1.1 MOTIVACIÓN

El estudio de texturas magnéticas topológicamente no triviales ha cobrado mucho interés recientemente debido a sus posibles aplicaciones tecnológicas [1], [2]. Entre las varias excitaciones topológicas que podemos encontrar en sistemas magnéticos destacan los Skyrmiones magnéticos, configuraciones tipo partícula, con prometedoras aplicaciones en la espíntrónica [2].

Trabajos experimentales recientes han dado fuertes evidencias de la presencia de arreglos cristalinos de Skyrmiones en magnetos quirales [3], lo que ha impulsado el estudio de este tipo de sistemas.

En un trabajo reciente, Rosales, Cabra y Pujol [4] estudiaron un modelo de Heisenberg Antiferromagnético en la red triangular, en el que está presente la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya. Mostraron que al aplicar un campo externo, aparece en el diagrama de fases del modelo una novedosa fase a la que denominaron AF-SkX. La misma consiste en tres redes de Skyrmiones interpenetradas.

La protección topológica nos asegura la robustez de los Skyrmiones frente fluctuaciones térmicas, lo cual es extremadamente beneficioso en un contexto de aplicación tecnológica. Aún así, no está del todo claro si los efectos cuánticos pueden llegar a estabilizar o desestabilizar estas fases de Skyrmiones.

En este trabajo nos proponemos estudiar la estabilidad de fases de Skyrmiones en sistemas magnéticos en dos dimensiones frente a fluctuaciones cuánticas. En particular, nos interesa comparar los efectos que tienen las fluctuaciones sobre las distintas fases de Skyrmiones que aparecen en la red triangular con interacciones de intercambio y Dzyaloshinsky-Moriya. Como ejemplo ilustrativo, tratamos tambien la red cuadrada ferromagnética con interacción de Dzyaloshinsky-Moriya.

Primero, tratamos los sistemas desde un punto de vista clásico, valiendonos de técnicas numéricas y simulaciones para encontrar las configuraciones de mínima energía a T = 0 y distintos valores del campo magnético externo aplicado.

Luego, usando la transformación de Holstein-Primakoff, estudiamos el efecto de las fluctuaciones alrededor de estas configuraciones en la aproximación de la Teoría Lineal de Ondas de Espín. Comparamos el efecto de estas fluctuaciones entre los

1 Introducción

modelos estudiados y analizamos el rango de validez de la aproximación lineal de ondas de espín.

1.2 Interacciones en Sistemas de Espín

En esta sección consideramos tres tipos de interacciones que estan presentes en los sistemas de interés: la interacción de intercambio, la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya [5], [6] y el acoplamiento Zeeman con un campo magnético aplicado. Veremos en la Sección 2.2 que estas tres interacciones juntas favorecen la aparición de fases de Skyrmiones en magnetos quirales.

1.2.1 INTERACCIÓN DE INTERCAMBIO

Las interacciones de intercambio juegan un rol central en magnetismo, donde son responsables de dar origen a órdenes de largo alcance. Este tipo de interacción deriva de las propiedades fundamentales del electrón: el espín, la energía cinética (deslocalización), la estadística de Fermi-Dirac y la repulsión Coulombiana entre electrones.

Consideramos un modelo sencillo que pone en evidencia el origen de esta interacción para el caso ferromagnético.

Sean dos electrones localizados que se repelen por efecto de la interacción Coulombiana. Los electrones ocupan orbitales ϕ_1 y ϕ_2 cuyas energías ε_1 y ε_2 son cercanas.

En el marco de la segunda cuantización, el campo de los electrones puede expandirse en la base de estados ϕ_i :

$$\psi_s^{\dagger} = \sum_{i=1}^2 \phi_i^* c_{is}^{\dagger}, \quad s = \uparrow, \downarrow, \qquad (1.1)$$

donde c_{is}^{\dagger} son operadores de creación fermiónicos, es decir que cumplen que $\{c_{is}, c_{js'}^{\dagger}\} = \delta_{ij}\delta_{ss'}$.

La interacción Coulombiana puede ser escrita como

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int d^3x \, d^3y \, \tilde{v}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \sum_{s,s'} \psi_s^{\dagger}(\boldsymbol{x}) \psi_{s'}^{\dagger}(\boldsymbol{y}) \psi_{s'}(\boldsymbol{y}) \psi_s(\boldsymbol{x}) \,. \tag{1.2}$$

Podemos utilizar (1.1) para expresar (1.2) como

$$\mathcal{V} = \sum_{i \neq i'} U_{ii'} n_i n_{i'} + \sum_i U_{ii} \rho_{i\uparrow} \rho_{i\downarrow} + \sum_{ss', i \neq i'} J^F c^{\dagger}_{is} c^{\dagger}_{i's'} c_{is'} c_{i's} , \qquad (1.3)$$

donde $\rho_{is} = c_{is}^{\dagger} c_{is}$ y $n_i = \sum_s \rho_{is}$.

Los parámetros de la interacción estan dados por las integrales directas

$$U_{ii'} = \frac{1}{2} \int d^3x \, d^3y \, \tilde{v}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) |\phi_i(\boldsymbol{x})|^2 |\phi_{i'}(\boldsymbol{y})|^2$$
(1.4)

y la constante de intercambio directa ferromagnética

$$J^{F} = \frac{1}{2} \int d^{3}x \, d^{3}y \, \tilde{v}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \phi_{i}(\boldsymbol{x}) \phi_{i'}^{*}(\boldsymbol{x}) \phi_{i'}(\boldsymbol{y}) \phi_{i}^{*}(\boldsymbol{y}) \,.$$
(1.5)

Puede verificarse que las integrales $U_{ii'}$ son reales y que J^F es positiva. Si

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U_{12} < \min(2\varepsilon_1 + U_{11}, 2\varepsilon_2 + U_{22}), \qquad (1.6)$$

se favorece un estado fundamental con ambos electrones ocupando orbitales distintos y los estados de baja energía estan dados por

$$\{|s_1, s_2\rangle\} \quad s_i = \uparrow, \downarrow . \tag{1.7}$$

La interaccion de intercambio J^F actúa en el espacio (1.7) como

$$J^{F} \sum_{ss'} c_{is}^{\dagger} c_{i's'}^{\dagger} c_{is'} c_{i's} = -J^{F} \left(\boldsymbol{S}_{i} \cdot \boldsymbol{S}_{i'} + \frac{1}{4} n_{i} n_{i'} \right), \qquad (1.8)$$

donde S_i^{α} con $\alpha = x, y, z$ son las componentes del operador de espín- $\frac{1}{2}$

$$\mathbf{S}_{i} = \frac{1}{2} \sum_{ss'} c_{is}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{is'} \,. \tag{1.9}$$

La integral de intercambio (1.5) depende del solapamiento espacial entre los orbitales ϕ_1 y ϕ_2 . El segundo término de (1.8) es una constante que puede ser eliminada redefiniendo el cero de la energía.

De esta manera el modelo efectivo para describir los grados de libertad magnéticos de un aislante es el *modelo de Heisenberg* cuyo Hamiltoniano es

$$\hat{\mathcal{H}}_H = -\sum_{i,j} J_{ij} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j , \qquad (1.10)$$

donde la suma recorre todos los sitios de una red.

El caso en el que J > 0 es el caso de un ferromagneto, donde la interacción favorece que los espines se alineen en la misma dirección. El caso en que J < 0 es el caso de un antiferromagneto, donde la interacción favorece que los espines apunten en dirección contraria a sus vecinos. Para ver en detalle el desarrollo expuesto, ver por ejemplo Auerbach [7].

1.2.2 INTERACCIÓN DE DZYALOSHINSKY-MORIYA

En 1958, Dzyaloshinsky publicó su primer trabajo [5] sobre la interacción ahora conocida como *interacción de Dzyaloshinsky-Moriya*. En su trabajo consideró la aparición de momentos ferromagnéticos uniformes en materiales que eran considerados antiferromagnetos puros: $\alpha - \text{Fe}_2\text{O}_3$, MnCO₃ y CoCO₃. Dzyaloshinsky predijo la existencia de una interacción efectiva de la forma $\boldsymbol{D} \cdot (\boldsymbol{S}_1 \times \boldsymbol{S}_1)$ para un par de momentos magnéticos vecinos \boldsymbol{S}_1 y \boldsymbol{S}_2 , donde el vector constante \boldsymbol{D} refleja la naturaleza de la



Figura 1.1: Estructúra cristalina del MnSi visto desde el plano (111) en (a) y (100) en (b). Las esferas grandes (chicas) representan a los átomos de Mn (Si).

simetría espacial rota en el entorno atómico de un cristal en particular. Este término rompería la simetría de rotación frente a una rotación arbitraria, pero permanecería invariante frente a rotaciones que preservaran D. El vector D debe anularse si la estructura atómica tuviera una simetría de inversión respecto al centro geométrico entre los iones magnéticos interactuantes. Por lo tanto, es de esperarse que dicha interacción esté presente solo en sistemas con simetría de inversión rota.

En la *Figura* 1.1 se muestra la estructura cristalina del MnSi, compuesto donde está presente la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya entre los iones de Mn (esferas grandes).

Poco después del trabajo de Dzyaloshinsky, Moriya publicó dos trabajos [6], [8] donde derivó, partiendo de un modelo microscópico, los términos de interacción que Dzyaloshinsky había predicho a partir de argumentos de simetría. En principio, la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya tiene su origen en el acoplamiento espín-órbita.

El Hamiltoniano efectivo que describe esta interacción es

$$\hat{\mathcal{H}}_{DM} = \sum_{ij} \boldsymbol{D}_{ij} \cdot (\boldsymbol{S}_i \times \boldsymbol{S}_j).$$
(1.11)

Esta interacción, por sí sola, favorece configuraciones donde cada espín es perpendicular a sus vecinos y al vector D_{ij} .

1.2.3 INTERACCIÓN CON UN CAMPO MAGNÉTICO

El acoplamiento entre el momento magnético intrínseco de los electrones, $\boldsymbol{\mu} = g\mu_B \boldsymbol{S}$, y un campo magnético aplicado \boldsymbol{h} da orígen a la energía de interacción Zeeman. El Hamiltoniano que describe esta interacción es:

$$\hat{\mathcal{H}}_Z = -g\mu_B \sum_i \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{h} \,, \tag{1.12}$$

donde μ_B es el magnetón de Bohr y g el factor de Landé. Esta interacción favorece una configuración en la que los espines estan alineados con el campo magnético aplicado.

1.3 Ondas de Espín

A T = 0 un sólido está ordenado, pero la presencia de fluctuaciones de punto cero implican que incluso en el cero absoluto los átomos no están puramente "congelados". Para T finita, el orden es perturbado por excitaciones térmicas, vibraciones de la red, que estan cuántizadas y se denominan fonones [9]. El comportamiento de dichos fonones esta caracterizado por su relación de dispersión $\omega(\mathbf{k})$.

De forma análoga, un sistema magnético puede estar ordenado a T = 0, pero ese órden magnético puede ser perturbado por ondas de espín, que están cuantizadas y se denominan magnones. Los magnones, al igual que los fonones, son modos de Goldstone: su relación de dispersión cumple que $\omega(0) = 0$ y su origen es la ruptura de una simetría contínua global, en este caso, ruptura de la simetría frente a rotaciones globales de los espines del sistema.

La teoría de ondas de espín ha resultado exitosa en el estudio de una gran variedad de sistemas magnéticos [10]-[12].

1.3.1 Representación de Holstein-Primakoff

En 1940, Holstein y Primakoff [13] introdujeron una representación de los operadores de espín en términos de operadores bosónicos. La representación de Holstein-Primakoff consiste en identificar al operador de espín en términos de operadores bosónicos canónicos como

$$\hat{S}^+ = \sqrt{2s - \hat{n}} \,\hat{a}$$
 (1.13)

$$\hat{S}^- = \hat{a}^\dagger \sqrt{2s - \hat{n}} \tag{1.14}$$

$$\hat{S}^z = s - \hat{n} \,, \tag{1.15}$$

donde $\hat{n} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ y cumplen la relación de conmutación de operadores bosónicos, $[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1.$

Los operadores de espín $\hat{S}^x = \frac{1}{2}(\hat{S}^+ + \hat{S}^-), \hat{S}^y = \frac{1}{2i}(\hat{S}^+ - \hat{S}^-)$ y \hat{S}^z , en la representación de Holstein-Primakoff (1.13), siguen obedeciendo las relaciones de conmutación

$$\left[\hat{S}^{\alpha}, \hat{S}^{\beta}\right] = i\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\hat{S}^{\gamma} \quad \alpha, \beta, \gamma = x, y, z.$$
(1.16)

El espacio de Fock de estos operadores contiene un subespacio de estados físicos

$$\{|n\rangle\}_s = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |2s\rangle\}$$
(1.17)



Figura 1.2: Representacion de una onda de espín en una vista lateral (arriba) y superior (abajo).

junto con un conjunto de estados no físicos donde n > 2s. Los operadores de (1.13) no conectan estados físicos con estados no físicos gracias al término dentro de la raíz.

La representación de Holstein-Primakoff es útil para describir fluctuaciones alrededor de un estado ordenado.

Partiendo del Hamiltoniano de un sistema, podemos estudiar las fluctuaciones alrededor de una de sus configuraciones clásicas. Para ello, expresamos el Hamiltoniano de tal forma que el eje de cuantización del espín en cada sitio apunte en la dirección de una configuración local del sistema clásico. Luego, reescribimos el Hamiltoniano en la representación de Holstein-Primakoff (1.13). En general, el Hamiltoniano no puede expresarse en una forma sencilla en función de los operadores $\hat{a} \ge \hat{a}^{\dagger}$, sin recurrir a alguna aproximación.

Una posibilidad es expandir el término en la raíz cuadrada de (1.13) en potencias de $\frac{\hat{n}}{2s}$,

$$\sqrt{2s - \hat{n}} = \sqrt{2s} \left(1 - \frac{\hat{n}}{4s} - \frac{\hat{n}^2}{32s^2} \dots \right).$$
(1.18)

Si asumimos a priori que $\langle \hat{n} \rangle \ll 2s$, uno puede quedarse con los primeros términos de la serie y tratar el resto perturbativamente.

La expansión (1.18) es una expansión semiclásica. Mientras más términos de la expansión descartamos, más nos aproximamos al comportamiento del sistema clásico y viceversa, mientras más términos de la expansión conservamos, más nos acercamos al comportamiento del sistema puramente cuántico. Para $s \to \infty$ recuperamos el comportamiento clásico del sistema.

Una práctica común es quedarse a primer orden en (1.18). Esta aproximación, conocida como Teoría Lineal de Ondas de Espín, lleva a un Hamiltoniano cuadrático en los operadores \hat{a} y \hat{a}^{\dagger} , el cuál se interpreta como un Hamiltoniano de magnones libres. Términos de orden superior, correspondientes a interacciones entre los magnones, pueden ser tratados perturbativamente.

La validez de la teoría lineal de ondas de espín depende de si la condición $\langle \hat{n} \rangle << s$ se cumple. El truncamiento de la expansión (1.18) introduce un inconveniente, el acoplamiento del subespacio físico y los estados no físicos, por lo que hay que ser cuidadoso de no introducir estados no físicos al calcular cantidades físicas relevantes.

1.4 Skyrmiones



Figura 1.3: Skyrmiones representados en el discreto: Skyrmion tipo Neel (izquierda) y Skyrmion tipo Bloch (derecha)

1.4 Skyrmiones

El concepto de Skyrmion, desarrollado originalmente por T. H. R. Skyrme, tiene su origen en la física nuclear. En una serie de trabajos publicados entre 1954 y 1962 [14]-[16], Skyrme propone un modelo en el que protones y neutrones existen como solitones topológicos. Estos solitones son configuraciones tipo partícula del campo de piones. Hoy en día estos solitones y sus análogos en otras áreas de la física son conocidos como Skyrmiones.

En 1989, Bogdanov y Yablonsky [17] predijeron la aparición de redes de Skyrmiones magnéticos en ferromagnetos anisotrópicos no centrosimétricos al aplicarse un campo magnético. Esto fue confirmado experimentalmente en el compuesto MnSi en el año 2009 por Muhlbauer, Binz, Jonietz y col. [3], usando técnicas de dispersión de neutrones a bajo ángulo (SANS). Recientemente se han observado directamente Skyrmiones aislados mediante microscopía electrónica [18].

En general, este tipo de texturas estás asociadas a la presencia de la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya, por lo que se espera que aparezcan en en sistemas sin simetría de inversión como es el caso del MnSi, $Fe_{1-x}Co_xSi$, FeGe, semiconductores con estructura B20 y Cu₂OSeO₃. Sin embargo, por el amplio significado del término Skyrmion, tambien se han observado este tipo de excitaciones en condensados de Bose-Einstein y Cristales Líquidos [19], [20].

Cabe aclarar que los Skyrmiones magnéticos no tienen una conexión directa con los Skyrmiones en física nuclear, excepto por el hecho que en ambos contextos las configuraciones del sistema son solitones con propiedades topológicas análogas.

Los Skyrmiones magnéticos tienen tamaños que van desde los 10nm a los 100nm dependiendo de los parámetros del material. Pueden ser creados o destruidos por campos magnéticos [2]. Debido a su pequeño tamaño y estabilidad, sumado a su alta movilidad al aplicarse corrientes de muy baja intensidad, los Skyrmiones magnéticos están siendo investigados debido a su potencial uso para almacenar información [1].

1.4.1 Origen del Skyrmion

Skyrme considero inicialmente un par de campos $\mathbf{n}(t,x) = (n_1, n_2)$ en 1 + 1 dimensiones junto con el Lagrangiano

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \int dx \left[(\partial_t \boldsymbol{n})^2 - (\partial_x \boldsymbol{n})^2 - m\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{n} \right].$$
(1.19)

En principio, la ecuación de movimiento asociada a (1.19) es la ecuación de Klein-Gordon. Adicionalmente Skyrme impuso la restricción

$$\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{n} = 1 \tag{1.20}$$

a fines de construir una teoría no lineal.

Esto implica que n es un punto de S^1 , el círculo unidad.

Eligiendo la parametrización

$$\boldsymbol{n} = (\cos\theta, \sin\theta), \qquad (1.21)$$

el Lagrangiano (1.19) nos queda

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \int dx \left[(\partial_t \theta)^2 - (\partial_x \theta)^2 \right].$$
(1.22)

Las simetrías continuas de esta nueva teoría llevan a leyes de conservación por el teorema de Noether.

Skyrme notó que en esta teoría existe otro tipo de ley de conservación, no relacionada a cuestiones de simetría.

Uno puede construir una densidad de corriente conservada

$$J_{\mu} = \frac{1}{2\pi} \varepsilon_{\mu\nu} \varepsilon_{ab} n_a \partial_{\nu} n_b, \quad \mu, \nu = t, x, \quad a, b = 1, 2.$$
(1.23)

Escribiendo $\partial_{\mu} J_{\mu}$ con ayuda de la parametrización (1.21), se puede comprobar que esta corriente se conserva.

Se puede comprobar esta ley de conservación sin recurrir a una parametrización específica, notando que

$$\partial_{\mu}J_{\mu} = \frac{1}{2\pi}\varepsilon_{\mu\nu}\varepsilon_{ab}\partial_{\mu}n_{a}\partial_{\nu}n_{b} = \frac{1}{\pi}\frac{\partial[n_{1},n_{2}]}{\partial[t,x]},\qquad(1.24)$$

la divergencia $\partial_{\mu}J_{\mu}$ es proporcional al Jacobiano del mapeo bidimensional de (t, x)a (n_1, n_2) . Recordamos que el Jacobiano es una medida del área cubierta en el espacio de los (n_1, n_2) al recorrer un pequeño parche $\Delta t \Delta x$ en el espacio de los (t, x). Pero por la restricción (1.20), \mathbf{n} solo puede trazar trayectorias en el círculo unidad. No hay un elemento de área que recorrer en el espacio de los (n_1, n_2) , por lo que el Jacobiano de la transformación debe ser cero, y por lo tanto la corriente J_{μ} obedece una ecuación de continuidad. Este resultado es independiente de la parametrización elegida. Podemos usar la parametrización (1.21) para obtener más información sobre la carga conservada. Si escribimos $J_t = \rho = (1/2\pi)\partial_x\theta$ como una densidad, la carga total asociada a una configuración particular del campo $\theta(t, x)$ es

$$Q(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \,\rho(t,x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \,\partial_x \theta(t,x) = \frac{1}{2\pi} [\theta(t,\infty) - \theta(t,-\infty)] \,. \tag{1.25}$$

Debido a que $\partial_{\mu}J_{\mu} = 0$, Q es una constante de movimiento.

Si imponemos una condición de contorno periódica, $\boldsymbol{n}(t,\infty) = \boldsymbol{n}(t,-\infty)$, entonces

$$\theta(t,\infty) = \theta(t,-\infty) + 2\pi N, \quad N \in \mathbb{Z},$$
(1.26)

y llegamos a que Q = N, el winding number de la transformación. Los argumentos que llevaron a identificar a Q como el winding number son puramente matemáticos, en el sentido que no recurrimos al Hamiltoniano ni a la dinámica del campo. Los argumentos usados son de carácter topológico. La ley de conservación y la corriente conservada son llamadas topológicas respectivamente. La idea original de Skyrme fue asociar los números topológicos en teorías de campos no lineales a números cuánticos de partículas sub-atómicas.

Si identificamos $x = \infty$ con $x = -\infty$, el mapeo $\theta(t, x)$ puede pensarse como un mapeo del círculo unidad al círculo unidad, es decir

$$\theta : S^1 \longmapsto S^1 \,. \tag{1.27}$$

El winding number de $\theta(x)$ nos dice cuantas veces el codominio S^1 es cubierto al recorrerse el dominio S^1 una sola vez. Este número tiene que ser un número entero. Esto se expresa como

$$\pi_1(S^1) = \mathbb{Z} \,, \tag{1.28}$$

el primer grupo de homotopía de S^1 es \mathbb{Z} .

Ahora estudiamos el caso donde $\boldsymbol{n}(t, x, y) = (n_1, n_2, n_3)$, con la restricción

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1. (1.29)$$

Con esta restricción, \boldsymbol{n} es un elemento de S^2 . Si asumimos que $\lim_{r\to\infty} \boldsymbol{n}(t,r,\phi) = \boldsymbol{n}_{\infty}$, podemos identificar \mathbb{R}^2 con S^2 usando la proyección estereográfica. Un resultado interesante en el estudio de grupos de homotopía es que $\pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$, lo que nos asegura que el mapeo \boldsymbol{n} va a estar caracterizado por un número entero. Es una práctica común referirse a mapeos topológicamente no triviales de la esfera a la esfera como Skyrmiones.

Guiados por el caso en (1+1) dimensiones comenzamos por escribir una densidad de corriente topológica en (2+1) dimensiones por analogía:

$$J_{\mu} = \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{\mu\nu\xi} \varepsilon_{abc} n_a \partial_{\nu} n_b \partial_{\xi} n_c , \quad \mu, \nu, \xi = t, x, y , \quad a, b, c = 1, 2, 3.$$
(1.30)

La ecuación de continuidad topológica $\partial_{\mu}J_{\mu} = 0$, viene nuevamente del hecho que

$$\partial_{\mu}J_{\mu} \propto \frac{\partial[n_1, n_2, n_3]}{\partial[t, x, y]}.$$
 (1.31)

El Jacobiano de la transformación es nulo gracias a la restricción (1.29). La densidad de carga topológica esta dada por

$$J_t = \frac{1}{4\pi} \boldsymbol{n} \cdot \left(\frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial y}\right). \tag{1.32}$$

La carga topológica $Q = \int dx \, dy \, J_t(t, x, y)$ es un número entero y una constante de movimiento. Esta cantidad cuenta cuantas veces el vector \boldsymbol{n} cubre S^2 a medida que se recorre el espacio de (x, y) por completo una vez.

Si pasamos a coordenadas polares (r, ϕ) vemos que una forma general para \boldsymbol{n} puede obtenerse partiendo de la proyección estereográfica de \mathbb{R}^2 a S^2 [21]. La forma general de \boldsymbol{n} con winding number N resulta

$$\boldsymbol{n}_{S} = (\sin [f(r)] \cos [N(\phi + \phi_{0})], \sin [f(r)] \sin [N(\phi + \phi_{0})], \cos [f(r)]), \qquad (1.33)$$

donde f(r) cumple que $f(0) = 0(\pi)$ y $f(\infty) = \pi(0)$.

La densidad de carga topológica del Skyrmion (1.33) está dada por

$$\rho_S = \frac{1}{4\pi} \boldsymbol{n}_S \cdot (\partial_x \boldsymbol{n}_S \times \partial_y \boldsymbol{n}_S) = \frac{1}{4\pi r} f'(r) \sin[f(r)], \qquad (1.34)$$

por lo que la carga topológica resulta

$$Q_S = \frac{N}{2} \int_0^\infty dr \, f'(r) \sin\left[f(r)\right] = N \cdot \frac{n_3(0) - n_3(\infty)}{2} \,. \tag{1.35}$$

Vemos que Q_S difiere del *winding number* como mucho en el signo. En contextos de materia condensada se suele llamar *vorticidad* a N y *polaridad* a $P = (n_3(0) - n_3(\infty))/2$. La carga topológica queda entonces definida por el producto de dos enteros:

$$Q_S = N \cdot P \,. \tag{1.36}$$

2 Skyrmiones en Sistemas Magnéticos

En este capítulo veremos como los Skyrmiones aparecen como configuraciones de mínima energía en sistemas magnéticos en los que esta presente la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya. Partimos de la teoría de Guinzburg-Landau para magnetos quirales desarrollada por Bak y Jensen [22]. Veremos que en ausencia de un campo magnético estos sistemas adoptan configuraciones en espiral.

2.1 Teoría de Guinzburg-Landau para Magnetos Quirales

Empezamos con la densidad de energía libre de un ferromagneto ordinario en d dimensiones:

$$f_H = \frac{J}{2} \sum_{\mu=1}^d (\partial_\mu \boldsymbol{S}) \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{S}) + \frac{u}{4} (\boldsymbol{S}^2 - s^2)^2.$$
(2.1)

Si $u \to \infty$ y s=1, esta densidad de energía libre es equivalente a la del modelo sigma no lineal.

En cristales cúbicos con simetría de inversión rota (como son el MnSi y el FeGe) podemos agregar un término correspondiente a la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya:

$$f_{DM} = D \, \boldsymbol{S} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{S}) \,. \tag{2.2}$$

La energía libre propuesta por Bak y Jensen para un magneto quiral en ausencia de un campo magnético es

$$F_{HDM} = \int d^d x \left(\frac{J}{2} \sum_{\mu=1}^d (\partial_\mu \mathbf{S}) \cdot (\partial_\mu \mathbf{S}) + \frac{u}{4} (\mathbf{S}^2 - s^2)^2 + D \, \mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{S}) + f_A \right),$$
(2.3)

donde f_A es un término correspondiente a la anisotropía del cristal.

Proponemos un ansatz variacional correspondiente a un estado espiral

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \right), \qquad (2.4)$$

11

2 Skyrmiones en Sistemas Magnéticos

donde S_k es un vector de coeficientes de Fourier complejo que cumple $S_{-k} = S_k$, dado que S(r) es real.

Si insertamos (2.4) en (2.3) e integramos en todo el espacio llegamos a que

$$\langle f_{HDM} \rangle = \frac{J}{2} \mathbf{k}^2 \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}} + iD\mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{S}_{\mathbf{k}})$$
 (2.5)

$$+\frac{u}{4}\left(\boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k}}-s^{2}\right)^{2}+\frac{u}{8}\left(\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k}}\right)\left(\boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{k}}\right).$$
(2.6)

Hemos descartado los términos de anisotropía en (2.5), ya que en compuestos como el MnSi estos términos son despreciables frente a los otros.

El tercer término fija el valor de la componente de Fourier, $S_{-k} \cdot S_k = s^2$, provisto que $S_k \cdot S_k = 0$.

Para encontrar la configuración de mínima energía descomponemos a S_k en un par de vectores reales:

$$\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} + i\boldsymbol{b}_{\boldsymbol{k}} \,. \tag{2.7}$$

El término correspondiente a la energía de Dzyaloshinsky-Moriya nos queda

$$\langle f_{DM} \rangle = 2D \boldsymbol{k} \cdot (\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{b}_{\boldsymbol{k}}).$$
 (2.8)

La situación más favorable es cuando a_k y b_k son ortogonales, tienen la misma amplitud y están en el plano perpendicular a k. Para D > 0 la energía del término de Dzyaloshinsky-Moriya es negativa si $k \cdot (a_k \times b_k) < 0$, lo que en el espacio real representa una espiral en el sentido antihorario.

Vemos como en un magneto quiral la simetría quiral se rompe explícitamente debido a la Interacción de Dzyaloshinsky-Moriya.

Bajo las condiciones impuestas la densidad de energía libre nos queda

$$\langle f_{HDM} \rangle = J \Big(|\mathbf{k}|^2 - 2\kappa |\mathbf{k}| \Big) |\mathbf{a}_{\mathbf{k}}|^2,$$
 (2.9)

donde $\kappa = \frac{D}{I}$.

La amplitud del vector de onda de la espiral queda entonces determinada por el cociente entre el módulo de D y la energía de intercambio J, $|\mathbf{k}| = \kappa = D/J$.

No se puede determinar la orientación de k por el análisis anterior, ya que todos los términos involucrados son invariantes frente a una rotación simultánea del espín y las coordenadas espaciales. La energía libre permanece igual siempre y cuando el triple producto $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a_k} \times \mathbf{b_k})$ no cambie. El vector \mathbf{k} es un elemento de la esfera (d-1)-dimensional de radio κ . Se necesita de términos de anisotropía f_A para romper la degeneración en la orientación de \mathbf{k} .

En conclusión, en ausencia de un campo magnético, la textura de espín que minimiza la energía libre para D > 0 (D < 0) es una espiral en el sentido antihorario (horario). En la siguiente sección nos proponemos a responder qué pasa con el sistema cuando hay un campo magnetico externo aplicado. Encontraremos que los Skyrmiones son la configuración del sistema para dicho caso.

2.2 Skyrmiones como Solución Estable en un Campo Magnético

Los Skyrmiones no son configuraciones estables del sistema cuya energía libre es F_{HDM} [21]. Es necesario agregar un término correspondiente a un campo magnético externo aplicado para que la longitud característica, o radio R_S , de un Skyrmion no tienda a infinito. Si reemplazamos la forma general de un Skyrmion (1.33) en la energía libre F_{HDM} a la que se le ha sumado un término de interacción Zeeman y usando argumentos de análisis dimensional podemos determinar que

$$E_S = E_0 - c_{DM} R_s + c_Z R_s^2, (2.10)$$

donde c_{DM} y c_Z son constantes positivas que dependen de la interacciones de Dzyaloshinsky-Moriya y Zeeman. La interacción de intercambio es insensible al radio del Skyrmion. Vemos que con esta forma el mínimo de la energía libre ocurre para un radio R_S finito y positivo.

Para establecer este argumento cuantitativamente proponemos un ansatz variacional:

$$S_{S} = (\sin [f(u)] \cos [N(\phi + \phi_{0})], \sin [f(u)] \sin [N(\phi + \phi_{0})], \cos [f(u)]), \qquad (2.11)$$

donde $u = r/R_S$.

Estudiamos la dependencia de cada término de energía con el radio R_S del Skyrmion. El término de intercambio es intedependiente de R_s como lo habiamos predicho:

$$F_{H} = \frac{J}{2} \int dx \, dy \sum_{\mu=x,y} (\partial_{\mu} \mathbf{S}_{s}) \cdot (\partial_{\mu} \mathbf{S}_{s}) = \pi J \int_{0}^{\infty} du \, u \left[\left(f'(u) \right)^{2} + \frac{N^{2}}{u^{2}} (\sin[f(u)])^{2} \right].$$
(2.12)

El término de Dzyaloshinsky-Moriya

$$F_{DM} = DR_s \left(\int_0^{2\pi} d\phi \, \sin\left[(N-1)\phi + N\phi_0 \right] \right) \times \int_0^\infty du \, u \left(f' + \frac{N}{2u} \sin\left(2f\right) \right) \, (2.13)$$

da preferencia a Skyrmiones con N = 1. Tomando N = 1, llegamos a que

$$F_{DM} = (2\pi DR_s \sin \phi_0) \int_0^\infty du \ u \left(f' + \frac{\sin(2f)}{2u} \right), \tag{2.14}$$

13

2 Skyrmiones en Sistemas Magnéticos

este término tiene una dependencia lineal con R_S . Para D > 0 (D < 0), $\phi_0 = \pi/2$ $(-\pi/2)$ minimiza la energía. Esto es consistente con el hecho que a campo cero el sentido de la espiral para D > 0 (D < 0) es antihorario (horario).

Por último tratamos el término Zeeman,

$$F_Z = -2\pi B R_S^2 \int_0^\infty du \ u \ \cos f \ . \tag{2.15}$$

Si definimos una nueva variable adimensional $v = \kappa R_S \cdot u$, la energía nos queda

$$\frac{F_S}{2\pi J} = \int_0^\infty dv \, v \left(\frac{1}{2} (f')^2 + \frac{(\sin f)^2}{2v^2} + f' + \frac{\sin(2f)}{2v} + \frac{B}{\kappa^2 J} [1 - \cos f]\right), \quad (2.16)$$

con solo un parámetro libre $\frac{B}{\kappa^2 J}$. Se ha escrito el término de interacción Zeeman de forma tal que el estado completamente polarizado con f(v) = 1 tiene energía cero. La longitud característica para describir el Skyrmion es κ^{-1} , el mismo parámetro que define la longitud de onda de las espirales en ausencia de un campo magnético.

La escala de energía natural del sistema es

$$B_S = \kappa^2 J = \frac{D^2}{J} \,. \tag{2.17}$$

La Ecuación de Euler-Lagrange para f es

$$f'' + \frac{f'}{v} - \frac{\sin(2f)}{2v^2} + \frac{2\sin^2 f}{v} - \frac{B}{B_s}\sin f = 0.$$
 (2.18)

Para un dado valor de B/B_S , tenemos que resolver esta ecuación diferencial sujeta a las condiciones de contorno adecuadas en v = 0 y $v = \infty$.

Una condición de contorno razonable es pedir que lejos del centro del Skyrmion la magnetización S está alineada con el campo $(f(\infty) = 0)$. Esto es equivalente a pedir que P = -1, por lo que $Q_S = -1$.

Como no podemos resolver este problema exactamente, recurrimos a aproximaciones. En el régimen $r \gg 1$, (2.18) se reduce a la ecuación de Bessel modificada por lo que

$$f(r) \propto K_0 \left(\sqrt{\frac{B}{J}}r\right), \quad r \gg 1.$$
 (2.19)

Para $r \ll 1$ podemos linealizar (2.18), lo que nos da la solución

$$f(r) = \pi - A\kappa r \,, \quad r \ll 1 \,, \tag{2.20}$$

donde A es una constante.

Aunque (2.11) es una configuración posible, esto no nos asegura que es la configuración de mínima energía para todos los campos $B \neq 0$. Sabemos que para B = 0 la configuración que adopta el sistema es una configuración tipo espiral, y para campos suficientemente grandes es razonable que el sistema se encuentre en una configuración completamente polarizada. Esto quiere decir que hay dos valores del campo B_{c1} y B_{c2} tal que para $B_{c1} < B < B_{c2}$ los Skyrmiones son soluciones estables. Estos valores pueden estimarse numericamente [21]:

$$\frac{B_{c1}}{B_S} \approx 0.033$$
 , $\frac{B_{c2}}{B_S} \approx 0.296$. (2.21)

2.3 Fases de Múltiples Espirales

La teoría de Ginzburg-Landau para magnetos quirales predice correctamente que, en ausencia de un campo aplicado, el estado fundamental del sistema es una configuracion tipo espiral. Cuando se incluye un campo magnético externo la misma teoría predice que el estado fundamental es un Skyrmion. La estabilidad energética de un Skyrmion aislado implica que se pueden formar varios de estos, eventualmente cubriendo toda la red en arreglos periódicos. Estas configuraciones pueden entenderse de forma sencilla si son pensadas como una superposición de espirales. Un estado de múltiples espirales viene dado por

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{S}_0 + \sum_{\alpha} \left(\boldsymbol{S}_{\alpha} e^{i\boldsymbol{k}_{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{S}_{\alpha}^* e^{-i\boldsymbol{k}_{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}} \right), \qquad (2.22)$$

donde cada α se refiere a una espiral con vector de onda \mathbf{k}_{α} , cuyos espines rotan en un plano ortogonal a \mathbf{k}_{α} . El término adicional $\mathbf{S}_0 = (0, 0, n_0)$ se introduce con anticipando los efectos de un campo magnético aplicado en la dirección +z. La energía libre de Guinzburg-Landau del sistema es

$$F = \frac{J}{2} \sum_{\mu} (\partial_{\mu} \boldsymbol{S} - \kappa \hat{e}_{\mu} \times \boldsymbol{S})^{2} + \frac{u}{4} (\boldsymbol{S}^{2} - 1)^{2} - \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{S}, \qquad (2.23)$$

donde el primer término proviene de reescribir las interacciones de intercambio y Dzyaloshinsky-Moriya:

$$\frac{J}{2}\sum_{\mu}(\partial_{\mu}\boldsymbol{S})^{2} + D\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{S}) = \frac{J}{2}\sum_{\mu}(\partial_{\mu}\boldsymbol{S} - \kappa\hat{e}_{\mu}\times\boldsymbol{S})^{2} - \frac{D^{2}}{2J}.$$
(2.24)

Dado que D > 0 favorece una espiral en sentido antihorario, asumimos que todas las espirales en la configuración (2.22) son espirales en sentido antihorario y tienen la misma amplitud:

$$\boldsymbol{S}_{\alpha} = \frac{n_S}{2} e^{i\theta_{\alpha}} (\hat{e}_{1\alpha} - i\hat{e}_{2\alpha}) \,. \tag{2.25}$$

Los vectores deben ser tales que $\hat{e}_{1\alpha} \times \hat{e}_{2\alpha} = \hat{k}_{\alpha}$. Todos los vectores de onda tienen la misma magnitud k. Las fases θ_{α} se incluyen para mayor generalidad. Por lo general la espiral no impone ninguna restricción sobre el tamaño de S en todo el espacio. Lo que uno puede hacer para complacer al segundo término de (2.23) es imponer una restricción en promedio, es decir

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = 1.$$
 (2.26)

Si insertamos (2.22) en (2.23), y despreciamos el segundo término, llegamos a una expresión sencilla para la energía de la configuración

$$E = \frac{1}{2} N_{\alpha} n_S^2 \left(Jk^2 - 2Dk \right) - Bn_0 , \qquad (2.27)$$

donde N_{α} es el número de espirales que conforman la configuración. La energía se minimiza para $k = \kappa$ y $n_0 = \frac{B}{B_S}$. Encontramos que aquí aparece la escala de campo B_S que encotramos en cálculo de los Skyrmiones en la Sección 2.2. Una característica interesante es que la energía es insensible al número y orientación de las espirales en la configuración.

3 Teoría Lineal de Ondas de Espín

El Hamiltoniano microscópico que describe a un magneto quiral es

$$\hat{\mathcal{H}}_{HDMZ} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \boldsymbol{D}_{ij} \cdot (\boldsymbol{S}_i \times \boldsymbol{S}_j) - \sum_i \boldsymbol{h}_i \cdot \boldsymbol{S}_i.$$
(3.1)

En este capítulo reescribimos (3.1) en la representación de Holstein-Primakoff, en la aproximación lineal de ondas de espín. Luego, calculamos el valor de expectación en el vacío de los magnones para varias cantidades de interés.

3.1 CASO GENERAL \mathcal{H}_{HDMZ}

El estado fundamental de un sistema clásico es una dada configuración Ω^{cl} que minimiza $\mathcal{H}[\Omega]$. Como nos interesa describir pequeñas fluctuaciones alrededor de esta configuración podemos escribir el Hamiltoniano en términos de operadores de espín S'_i cuyo eje de cuantización apunta en la dirección de Ω_i^{cl} . Luego estudiar las fluctuaciones alrededor de esta configuración en la representación de Holstein-Primakoff.

Si la configuración de mínima energía esta dada en cada sitio por

$$\Omega_i^{cl} = \begin{bmatrix} \sin \theta_i \cos \phi_i \\ \sin \theta_i \sin \phi_i \\ \cos \theta_i \end{bmatrix},$$
(3.2)

entonces podemos escribir a S_i en función de espín en la base rotada, S'_i , como $S_i = R_i S'_i$, donde

$$R_i(\phi_i, \theta_i) = \begin{bmatrix} \cos \theta_i \cos \phi_i & -\sin \phi_i & \sin \theta_i \cos \phi_i \\ \cos \theta_i \sin \phi_i & \cos \phi_i & \sin \theta_i \sin \phi_i \\ -\sin \theta_i & 0 & \cos \theta_i \end{bmatrix}$$
(3.3)

es la inversa de la matríz que lleva \hat{z} a Ω_i^{cl} .

De aquí en adelante, para facilitar el desarrollo, escribimos el Hamiltoniano en notación de Einstein, en la que la suma sobre índices repetidos está implicita,

$$\mathcal{H}_{HDMZ} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^{\mu} S_j^{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \varepsilon^{\mu\nu\xi} D_{ij}^{\mu} S_i^{\nu} S_j^{\xi} - \sum_i h_i^{\mu} S_i^{\mu}.$$
(3.4)

El Hamiltoniano en la base local queda expresado como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{HDMZ} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S'^{\mu}_{\ i} \tilde{R}^{\mu\nu}_{i} R^{\nu\xi}_{j} S'^{\xi}_{\ j} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \varepsilon^{\mu\nu\xi} D^{\mu}_{ij} R^{\nu\rho}_{i} S'^{\rho}_{\ i} R^{\xi\tau}_{j} S'^{\tau}_{\ j} \\ &- \sum_{i} h^{\mu}_{i} R^{\mu\nu}_{i} S'^{\nu}_{\ i} \,. \end{aligned}$$

Con el fin de expresar el Hamiltoniano de una forma más compacta, definimos

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{ij}^{\mu\nu} &= J_{ij} R_i^{\xi\mu} R_j^{\xi\nu} + \varepsilon^{\xi\rho\tau} D_{ij}^{\xi} R_i^{\rho\mu} R_j^{\tau\nu} \\ \mathcal{B}_i^{\mu} &= h_i^{\nu} R_i^{\nu\mu}. \end{aligned}$$

La expresión compacta del operador Hamiltoniano en la base local resulta

$$\mathcal{H}_{HDMZ} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} S'^{\mu}_{i} \mathcal{J}^{\mu\nu}_{ij} S'^{\nu}_{j} - \sum_{i} \mathcal{B}^{\mu}_{i} S'^{\mu}_{i}.$$
(3.5)

En esta etapa podemos expresar el Hamiltoniano en la representación de Holstein-Primakoff. Si asumimos en un principio que $\langle n_i \rangle \ll 2s_i$ entonces podemos directamente quedarnos con el primer término de la expansión (1.18):

$${S'}_{i}^{1} = \frac{{S'}_{i}^{+} + {S'}_{i}^{-}}{2} \approx \frac{a_{i} + a_{i}^{\dagger}}{2} \sqrt{2s_{i}}$$
(3.6)

$${S'}_{i}^{2} = \frac{{S'}_{i}^{+} - {S'}_{i}^{-}}{2} \approx \frac{a_{i} - a_{i}^{\dagger}}{2i} \sqrt{2s_{i}}$$
(3.7)

$$S_{i}^{\prime 3} = s_{i} - a_{i}^{\dagger} a_{i}. \tag{3.8}$$

(3.9)

Reemplazamos (3.6) en (3.5) y agrupamos los términos en potencias de los operadores bosónicos,

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2 + \hat{\mathcal{H}}_3 + \hat{\mathcal{H}}_4, \qquad (3.10)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}_i = \mathcal{O}\left(s^{\frac{4-i}{2}}a^i\right).$

El término $\hat{\mathcal{H}}_1$, lineal en a_i y a_i^{\dagger} , se anula automaticamente debido a que la configuración clásica de partida se corresponde con un mínimo del Hamiltoniano clásico. Los coeficientes de este término se corresponden con gradientes de la energía clásica, que se anulan en el mínimo de energía.

Dentro de la aproximación lineal, podemos descartar los términos $\hat{\mathcal{H}}_3$ y $\hat{\mathcal{H}}_4$ correspondientes a interacciones entre las ondas de espín ya que esto es consistente con la suposición de que $\langle n_i \rangle << 2s_i$.

Analizamos ahora los términos $\hat{\mathcal{H}}_0$ y $\hat{\mathcal{H}}_2$ por separado, suponiendo que $s_i = s$ para todo sitio de la red.

El término $\hat{\mathcal{H}}_0$, de apariencia sencilla, se corresponde a la energía clásica del sistema:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{s^2}{2} \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij}^{33} - s \sum_i \mathcal{B}_i^3.$$
(3.11)

El término, $\hat{\mathcal{H}}_2$, correspondiente a magnones libres tiene la forma

$$\hat{\mathcal{H}}_{2} = \frac{s}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(\mathcal{J}_{ij}^{11} - \mathcal{J}_{ij}^{22} - i\mathcal{J}_{ij}^{12} - i\mathcal{J}_{ij}^{21} \right) a_{i}a_{j} + \frac{1}{2} \left(\mathcal{J}_{ij}^{11} + \mathcal{J}_{ij}^{22} - i\mathcal{J}_{ij}^{12} + i\mathcal{J}_{ij}^{21} \right) a_{i}^{\dagger}a_{j} + h.c - \mathcal{J}_{ij}a_{i}^{\dagger}a_{i} - \mathcal{J}_{ij}a_{j}^{\dagger}a_{j} + \sum_{i} \mathcal{B}_{i}^{3}a_{i}^{\dagger}a_{i}$$

Recordando que $\mathcal{J}_{ji}^{\nu\mu} = \mathcal{J}_{ij}^{\mu\nu}$ y usando la reglas de conmutación de los operadores llegamos a que

$$\hat{\mathcal{H}}_{2} = \frac{s}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{2} \left(\mathcal{J}_{ij}^{11} - \mathcal{J}_{ij}^{22} - i \mathcal{J}_{ij}^{12} - i \mathcal{J}_{ij}^{21} \right) a_{i} a_{j}$$
(3.12)

$$+\frac{1}{2} \left(\mathcal{J}_{ij}^{11} + \mathcal{J}_{ij}^{22} - i\mathcal{J}_{ij}^{12} + i\mathcal{J}_{ij}^{21} \right) a_i^{\dagger} a_j \tag{3.13}$$

$$-\mathcal{J}_{ij}^{33}a_{i}^{\dagger}a_{i} + h.c. + \mathcal{J}_{ij}^{33}$$
(3.14)

$$+\sum_{i}\frac{\mathcal{B}_{i}^{3}}{2}a_{i}^{\dagger}a_{i}+h.c.-\frac{\mathcal{B}_{i}^{3}}{2}.$$
(3.15)

Los términos constantes en $\hat{\mathcal{H}}_2$ son correcciones cuánticas a la energía clásica $\hat{\mathcal{H}}_0$.

Finalmente, el Hamiltoniano del sistema en la representación de Holstein-Primakoff queda expresado como

$$\hat{\mathcal{H}}_{HDMZ} = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \bar{\tau}_{ij} a_i a_j + t_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \bar{t}_{ij} a_i a_j^{\dagger} + \tau_{ij} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger}, \qquad (3.16)$$

donde hemos definido

$$E_{0} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij}^{33} s(s+1) - \sum_{i} \mathcal{B}_{i}^{3} \left(s + \frac{1}{2}\right)$$

$$t_{ij} = \frac{s}{2} \left(\mathcal{J}_{ij}^{11} + \mathcal{J}_{ij}^{22} - i\mathcal{J}_{ij}^{12} + i\mathcal{J}_{ij}^{21}\right), \quad i \neq j$$

$$t_{ii} = s \sum_{k} \mathcal{J}_{ik}^{33} + \mathcal{B}_{i}^{3}$$

$$\tau_{ij} = \frac{s}{2} \left(\mathcal{J}_{ij}^{11} - \mathcal{J}_{ij}^{22} + i\mathcal{J}_{ij}^{12} + i\mathcal{J}_{ij}^{21}\right), \quad i \neq j$$

$$\tau_{ii} = 0.$$

Luego, podemos escribir (3.16) en notación matricial,

$$\hat{\mathcal{H}} = E_0 + \frac{1}{2}\hat{\psi}^{\dagger} \cdot \mathcal{M} \cdot \hat{\psi} , \qquad (3.17)$$

donde

$$\hat{\psi} = \begin{bmatrix} a_1 & \dots & a_N & a_1^{\dagger} & \dots & a_N^{\dagger} \end{bmatrix}^t \quad , \quad \mathcal{M} = \begin{bmatrix} t & \tau \\ \bar{\tau} & \bar{t} \end{bmatrix}$$
(3.18)

Notar que $t^{\dagger} = t$ y $\tilde{\tau} = \tau$, lo que implica que $\mathcal{M}^{\dagger} = \mathcal{M}$, el Hamiltoniano es hermítico como corresponde.

Los términos anómalos $a_i a_j$ y $a_i^{\dagger} a_j^{\dagger}$ en el Hamiltoniano son una señal de que el número de bosones no es una cantidad conservada. Los operadores a_i y a_i^{\dagger} no son adecuados para describir el estado fundamental del sistema. Es decir, el vacío de estos bosones, $|0\rangle$, no coincide con el estado fundamental del sistema. Los modos normales del sistema pueden encontrarse mediante una transformación de Bogolyubov-Valatin de los operadores que diagonalize al Hamiltoniano.

Sea T una transformación lineal tal que $\hat{\psi} = T \cdot \hat{\phi}$, donde

$$\hat{\phi} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \dots & \alpha_N & \alpha_1^{\dagger} & \dots & \alpha_N^{\dagger} \end{bmatrix}^t,$$
(3.19)

 α_i^{\dagger} y α_i son unos nuevos operadores de creación y aniquilación. Para que los nuevos operadores cumplan las relaciones de conmutación de los bosones

$$\begin{split} & [\alpha_i, \alpha_j^{\dagger}] = \delta_{ij} \\ & [\alpha_i, \alpha_j] = 0 \\ & [\alpha_i^{\dagger}, \alpha_j^{\dagger}] = 0 \,, \end{split}$$

debe cumplirse que

$$T \cdot \sigma_3 \cdot T^{\dagger} = \sigma_3 \tag{3.20}$$

donde

$$\sigma_3 = \begin{bmatrix} I & 0\\ 0 & -I \end{bmatrix}. \tag{3.21}$$

El problema que afrontamos es el de encontrar una transformación T que cumpla (3.20) y diagonalice la matríz \mathcal{M} , es decir

$$T^{\dagger} \cdot \mathcal{M} \cdot T = D \tag{3.22}$$

donde D es una matriz diagonal.

Este problema ha sido extensamente estudiado en la literatura [23], [24]. Solo enunciaremos los resultados.

La forma general de la matriz de transformación es

$$T = \begin{bmatrix} U & V \\ \bar{V} & \bar{U} \end{bmatrix}.$$
(3.23)

La matriz Hamiltoniana adopta una forma sencilla en los nuevos bosones:

$$D = T^{\dagger} \mathcal{M} T = \begin{bmatrix} \omega_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \omega_N & & \\ & & & \omega_1 & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & & \omega_N \end{bmatrix}.$$
(3.24)

Las ω_i son las bandas de energía de los modos normales del sistema. Finalmente llegamos a que

$$\hat{\mathcal{H}}_{HDMZ} = E_0 + \frac{1}{2} \sum_i \omega_i \alpha_i^{\dagger} \alpha_i + \omega_i \alpha_i \alpha_i^{\dagger} = E_0 + \sum_i \omega_i \left(\alpha_i^{\dagger} \alpha_i + \frac{1}{2} \right).$$
(3.25)

El vacío de los nuevos bosones se corresponde con el estado fundamental del sistema. La energía de punto cero esta dada por $\frac{1}{2}\sum_{i}\omega_{i}$.

A T = 0 tenemos que el número de bosones α_i tiene valor de expectación nulo, no así los bosones a_i . Esto conlleva a que incluso a T = 0 el sistema no este completamente ordenado. Si el estado fundamental del sistema esta degenerado puede darse que las fluctuaciones cuánticas seleccionen el órden que minimiza la energía de punto cero. Esto se conoce como "orden por desorden cuántico", en analogía con el "orden por desorden" a temperatura finita donde las fluctuaciones térmicas seleccionan un orden entre estados degenerados.

3.2 VALORES DE EXPECTACIÓN

Una vez obtenida la transformación de Bogolyubov-Valatin T que diagonaliza a \mathcal{M} podemos calcular valores de expectación. Los operadores a_i y a_i^{\dagger} estan dados en función de los α_i y α_i^{\dagger} por

$$a_{i} = \sum_{j} U_{ij}\alpha_{j} + V_{ij}\alpha_{j}^{\dagger}$$
$$a_{i}^{\dagger} = \sum_{j} \bar{V}_{ij}\alpha_{j} + \bar{U}_{ij}\alpha_{j}^{\dagger}.$$

Sea \hat{A} un operador cualquiera, el valor de expectación de \hat{A} a T = 0 esta dado por $\langle \hat{A} \rangle_0 = \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle$, donde $| 0 \rangle$ es el vacío de los bosones α .

La ocupación n_i de los bosones a en el vacío de los bosones α esta dada por

$$\langle n_i \rangle_0 = \langle a_i^{\dagger} a_i \rangle_0$$

$$= \sum_{jk}^N \bar{V}_{ij} U_{ik} \langle \alpha_j \alpha_k \rangle_0 + \bar{V}_{ij} V_{ik} \langle \alpha_j \alpha_k^{\dagger} \rangle_0 + \bar{U}_{ij} U_{ik} \langle \alpha_j^{\dagger} \alpha_k \rangle_0 + \bar{U}_{ij} V_{ik} \langle \alpha_j^{\dagger} \alpha_k^{\dagger} \rangle_0$$

$$= \sum_j^N |V_{ij}|^2 .$$

Esta cantidad es de suma importancia, ya que la validez de la teoría lineal de ondas de espín se basa en que esta cantidad sea pequeña en comparación con 2s. La ocupación $\langle n_i \rangle_0$ nos da una medida de cuanto difiere el estado fundamental del sistema cuántico de la configuración de mínima energía de partida.

Otra cantidad de interés es la magnetización media por sitio

$$\hat{m}_z = \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} S_i^3 \,. \tag{3.26}$$

El valor de expectación de (3.26) en el fundamental esta dado por

$$\begin{split} \langle \hat{m}_{z} \rangle_{0} &= \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} \langle S_{i}^{3} \rangle_{0} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} \langle R_{i}^{31} S_{i}^{\prime 1} + R_{i}^{32} S_{i}^{\prime 2} + R_{i}^{33} S_{i}^{\prime 3} \rangle_{0} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} R_{i}^{33} \{ s_{i} - \langle n_{i} \rangle_{0} \} \,, \end{split}$$

22

donde usamos que $\langle a_i \rangle_0 = \langle a_i^{\dagger} \rangle_0 = 0$, pues $a_i \ge a_i^{\dagger}$ son lineales en los operadores $\alpha_i \ge \alpha_i^{\dagger}$. Resulta

$$\langle \hat{m}_z \rangle_0 = \frac{1}{N} \sum_i^N R_i^{33} \left\{ s_i - \sum_j^N |V_{ij}|^2 \right\}.$$
 (3.27)

Las fases de Skyrmiones en los sistemas que estudiamos estan caracterizadas por tener una carga topológica distinta de cero. Esta carga topológica juega el rol de parámetro de órden topológico, por lo que resulta interesante conocer su valor de expectación.

Una posible discretización de (1.32) es la llamada quiralidad total χ_L cuya expresión para la red triangular es

$$\chi_L = \frac{1}{8\pi} \sum_i \chi_{L,i}^{(12)} + \chi_{L,i}^{(34)} \,. \tag{3.28}$$

La cantidad $\chi^{(ab)}_{L,i},$ denominada quiralidad local, esta dada por

$$\chi_{L,i}^{(ab)} = \mathbf{S}_i \cdot \left(\mathbf{S}_{i+a} \times \mathbf{S}_{i+b}\right), \qquad (3.29)$$

donde subíndice i + a simboliza el vecino a del sitio i (ver *Figura* 4.1). El valor de expectación de la quiralidad local viene dado por

$$\begin{split} \langle \hat{\chi}_{L,i}^{(ab)} \rangle_0 &= \langle \boldsymbol{S}_i \cdot (\boldsymbol{S}_{i+a} \times \boldsymbol{S}_{i+b}) \rangle_0 \\ &= \varepsilon^{\mu\nu\xi} \langle S_i^{\mu} S_{i+a}^{\nu} S_{i+b}^{\xi} \rangle_0 \\ &= \varepsilon^{\mu\nu\xi} R_i^{\mu\rho} R_{i+a}^{\nu\tau} R_{i+b}^{\xi\psi} \langle S_i^{\prime\rho} S_{i+a}^{\prime\tau} S_{i+b}^{\prime\psi} \rangle_0 \end{split}$$

Nuevamente usando que $\langle a_i \rangle_0 = \langle a_i^{\dagger} \rangle_0 = 0$,

$$\langle S'_{i}^{\rho} S'_{i+a}^{\tau} S'^{\psi}_{i+b} \rangle_{0} = \delta^{\rho 3} \delta^{\tau 3} \delta^{\psi 3} \langle S'_{i}^{3} S'^{3}_{i+a} S'^{3}_{i+b} \rangle_{0} \,. \tag{3.30}$$

En la aproximación lineal de ondas de espín

$$\langle S'_{i}^{3}S'_{i+a}^{3}S'_{i+b}^{3}\rangle_{0} \approx s_{i}s_{i+a}s_{i+b} - \langle n_{i}\rangle_{0}s_{i+a}s_{i+b} - s_{i}\langle n_{i+a}\rangle_{0}s_{i+b} - s_{i}s_{i+a}\langle n_{i+b}\rangle_{0}$$
$$= s_{i}s_{i+a}s_{i+b}\left[1 - \sum_{j}^{N}\left(\frac{1}{s_{i}}|V_{ij}|^{2} + \frac{1}{s_{i+a}}|V_{i+aj}|^{2} + \frac{1}{s_{i+b}}|V_{i+bj}|^{2}\right)\right]$$

El valor medio de la quiralidad total es entonces

$$\langle \hat{\chi}_L \rangle_0 = \frac{1}{8\pi} \sum_i \langle \chi_{L,i}^{(12)} \rangle_0 + \langle \chi_{L,i}^{(34)} \rangle_0 ,$$
 (3.31)

23

3 Teoría Lineal de Ondas de Espín

donde

$$\langle \hat{\chi}_{L,i}^{(ab)} \rangle_{0} = \varepsilon^{\mu\nu\xi} R_{i}^{\mu3} R_{i+a}^{\nu3} R_{i+b}^{\xi3} s_{i} s_{i+a} s_{i+b} \left[1 - \sum_{j}^{N} \left(\frac{1}{s_{i}} |V_{ij}|^{2} + \frac{1}{s_{i+a}} |V_{i+aj}|^{2} + \frac{1}{s_{i+b}} |V_{i+bj}|^{2} \right) \right]$$
(3.32)

También tenemos en cuenta el valor de expectación de la ocupación n_i en los primeros estados excitados del sistema

$$\begin{aligned} \langle \alpha_k n_i \alpha_k^{\dagger} \rangle_0 &= \sum_{jm} \bar{V}_{ij} V_{im} \langle \alpha_k \alpha_j \alpha_m^{\dagger} \alpha_k^{\dagger} \rangle_0 + \bar{U}_{ij} U_{im} \langle \alpha_k \alpha_j^{\dagger} \alpha_m \alpha_k^{\dagger} \rangle_0 \\ &= |U_{ik}|^2 + |V_{ik}|^2 + \sum_j |V_{ij}|^2 \,. \end{aligned}$$

Esta cantidad da cuenta de la distribución espacial de una excitación en un estado k, esto es, como se distribuye espacialmente un bosón de Bogolyubov.

Complementamos la información que nos da $\langle \alpha_k n_i \alpha_k^{\dagger} \rangle_0$ con el valor de expectación de $a_i \alpha_k^{\dagger}$. Esta cantidad es conocida en la literatura como *overlap* [25] y da cuenta de la distribución espacial completa de la función de onda del estado excitado. En la teoría lineal de ondas de espín, el valor de esta cantidad viene dado por

$$\langle a_i \alpha_k \rangle_0 = U_{ik} \,. \tag{3.33}$$

.

4 Modelos Estudiados

En este capítulo presentamos los resultados obtenidos empleando la teoria lineal de ondas de espín en tres modelos bidimensionales de interés: las redes cuadrada y triangular con interacción de intercambio ferromagnética y la red triangular con interacción de intercambio antiferromagnetica. En los tres casos consideramos presente la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya, donde D_{ij} es un vector que apunta en la dirección de los enlaces a primeros vecinos,

$$\boldsymbol{D}_{ij} = \boldsymbol{D} \cdot \frac{\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i}{\|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\|}, \qquad (4.1)$$

junto con un campo magnético \boldsymbol{B} aplicado perpendicular al plano de la red. En el caso de la red triangular antiferromagnética, la geometría de la red junto con la interacción de Dzyaloshinsky-Moriya inducen frustración magnética. Como veremos, la combinación de ambos ingredientes conduce a comportamientos exóticos no presentes en los casos no frustrados.

Partiendo del análisis expuesto en el Capítulo 2, esperamos encontrar a T = 0, al menos en los casos ferromagnéticos, una fase de Skyrmiones para cierta ventana de valores del campo magnético B.

Como se exploró en los capítulos previos, dentro de la aproximación lineal de ondas de espín, el cual es un método semiclásico, es de vital importacia conocer la configuración magnética clásica a T = 0. En este trabajo, a fines de determinar las configuraciones magnéticas a T = 0, se emplearon dos metodos numéricos de amplio uso en magnetismo:

- El primero se basa en una estrategia autoconsistente mediante el cálculo del campo molecular efectivo en cada sitio. Este método resulta extremadamente útil debido a su rápida convergencia y escaso costo computacional.
- El segundo consiste en simulaciones Monte-Carlo basadas en el algoritmo de Metropolis-Hastings combinado con un *annealing* térmico para evitar estancamiento en los mínimos locales del sistema. Este método, resulta más robusto que el primero, pero es computacionalmente más costoso.

Esta combinación de técnicas fue propuesta con el objetivo de asegurarnos que las configuraciones magnéticas en todos los modelos resulten ser las de mínima energía para cada conjunto de parámetros. Los detalles del primer método se encuentran en el Apéndice A. Para los detalles del segundo método, el lector interesado puede consultar la literatura [26].

4 Modelos Estudiados



Figura 4.1: Representación gráfica de a) Red Cuadrada, b) Red Triangular. El campo magnétic
o ${\pmb B}$ apunta en dirección perpendicular al plano de la red.

4.1 Red Cuadrada Ferromagnética

El primer modelo tratado es un modelo de Heisenberg ferromagnético en una red cuadrada en dos dimensiones, donde D apunta en la dirección de los enlaces. El Hamiltoniano del sistema está dado por la ecuación (3.1). Como ejemplo, se presentan resultados para un sistema de $N = L^2$ sitios, con L = 20 y $D/J = \frac{1}{2}$, con condiciones de contorno periódicas. En la *Figura* 4.1a se ofrece una representación gráfica de la red.

Basándonos en la estimación de B_{c1} y B_{c2} dada en la ecuación (2.21), restringimos el estudio en la región de campo magnético donde 0, 0 < B/J < 0, 1.

Encontramos que el sistema adopta una configuración espiral para $0 < B/J \leq 0,02$, seguida de una fase de Skyrmiones (cuyo número depende de la magnitud del campo magnético) para $0,02 \leq B/J \leq 0,08$. Finalmente, para $0,08 \leq B/J$ surge una fase polarizada con el campo magnético. Debido a que el estudio se basa en redes de tamaño finito, estos valores difieren ligeramente de la estimación dada por la ecuación (2.21),

$$\frac{B_{c1}}{J} \approx 0,0085, \quad \frac{B_{c2}}{J} \approx 0,074.$$
 (4.2)

En la Figura 4.2 están representadas dos configuraciones representativas del sistema para la fase espiral y la fase de Skyrmiones, junto con una gráfica de la magnetización del sistema m_z vs *B*. La carga topológica (1.35), que nos permite identificar fases de Skyrmiones, toma los valores $Q_{Skr} = 0, 1, 2...$ En la Figura 4.2c se indican con colores el valor de la carga Q_{Skr} para cada región del campo magnético.

Usando las configuraciones clásicas como punto de partida, expresamos el Hamiltoniano en la representación de Holstein-Primakoff y calculamos los valores de expectación de interés en el régimen de la teoría lineal de ondas de espín para varios valores de s.



Figura 4.2: Configuraciones de mínima energía de la red cuadrada ferromagnética a T = 0: A) Configuración Espiral (B/J = 0.01), B) Skyrmion (B/J = 0.08). C) Magnetización m_z vs. B, y carga topológica/número de Skyrmiones Q_{Skr} .



Figura 4.3: Ocupación media $\langle n_i \rangle_0$ en el estado fundamental para a) Espiral, B/J = 0,01 y s = 2, y b) Skyrmion, B/J = 0,08 y s = 1/2, s = 2 y s = 10. Los magnones se encuentran distribuidos uniformemente en toda la red en a) y localizados alrededor del borde del Skyrmion en b). En b), la distribución de la ocupación varía con el valor del espín.

Puede observarse en la Figura 4.3 que la ocupación media $\langle n_i \rangle_0$ en el estado fundamental difiere para configuraciones en espiral y Skyrmiones. En la fase espiral $\langle n_i \rangle_0$ posee una distribución uniforme en toda la extensión de la red (ver Figura 4.3a). Por el contrario, en la fase de Skyrmion se observa una clara localización bosónica entre el centro y el borde del Skyrmion (ver Figura 4.3b). Esto indica que en la región espacial donde los espines están más "enroscados", las fluctuaciones cuánticas tienden a disminuir con mayor instensidad la magnitud del espín. Otra característica interesante es que la distribución de la ocupación cambia con el valor del espín, mostrando una tendencia a homogeneizar toda la distribución de bosones alrededor del Skyrmion.

Encontramos que tanto para el caso de configuraciones en espiral y de Skyrmiones aislados, la ocupación satisface $\langle n_i \rangle_0 \ll 2s$, confirmando la validez de la teoría lineal de ondas de espín para tratar a este sistema. Los valores de expectación de la magnetización \hat{m}_z en el fundamental se corresponden con los clásicos en muy buena



Figura 4.4: Valor medio de la magnetización por sitio (izquierda) y la magnetización local por sitio (derecha) vs. B/J en la red cuadrada ferromagnética, para varios valores de s.

aproximación (ver Figura 4.4), indicando que en el caso ferromagnético en la red cuadrada, las fluctuaciones cuánticas no desestabilizan la configuración clásica.



Figura 4.5: Ocupación media $\langle \alpha_{\nu} n_i \alpha_{\nu}^{\dagger} \rangle$ de los primeros cuatro modos de excitación para a) Fase Espiral (B/J = 0,01, s = 2) y b) Fase Skyrmion (B/J = 0,08, s = 2). Para el caso de la fase Espiral, claramente se observa una distribución tipo onda plana para todos los estados, mientras que para la fase de Skyrmiones, la distribución espacial tiene simetría d_{xy} ($\nu = 1$) y d_{z^2} ($\nu = 2, 3$).

A fines de obtener información de la distribución espacial de los estados excitados, calculamos la ocupación de los excitados $\langle \alpha_k n_i \alpha_k^{\dagger} \rangle$ y el *overlap* $\langle a_i \alpha_k^{\dagger} \rangle$ para los primeros cuatro modos de excitación del sistema. Recordamos que la primera cantidad nos dice cómo es la distribución espacial de un bosón de Bogolyubov, mientras que la segunda nos da una idea de como es la distribución espacial de la función de onda del estado excitado.

El valor de expectación de la ocupación y el módulo cuadrado del overlap nos muestran que la función de onda de los primeros cuatro estados excitados en la fase Espiral tiene una distribución tipo onda plana, mientras que para la fase de Skyrmiones, la distribución espacial tiene simetrías d_{xy} y d_{z^2} (ver Figuras 4.5 y 4.6). Esta simetría espacial sugiere que estos estados tienen momento angular orbital bien definido, lo que es compatible con los modos rotacionales del Skyrmion. Esto se debería verificar calculando el valor de expectación del momento angular $\langle \hat{L}_i \rangle$, no incluido en este trabajo.



Figura 4.6: Módulo cuadrado del overlap $|\langle a_i \alpha_{\nu}^{\dagger} \rangle|^2$ de los primeros cuatro modos de excitación para a) Fase Espiral (B/J = 0,01, s = 2) y b) Fase Skyrmion (B/J = 0,08, s = 2). Para el caso de la fase Espiral, claramente se observa una distribución tipo onda plana para todos los estados, mientras que para la fase de Skyrmiones, la distribución espacial tiene simetría d_{xy} ($\nu = 1$) y d_{z^2} ($\nu = 2,3$).

4.2 Red Triangular Ferromagnética

El segundo modelo tratado es un modelo de Heisenberg ferromagnético en una red triangular en dos dimensiones, donde D apunta en la dirección de los enlaces como se muestra en la *Figura* 4.1b. El Hamiltoniano del sistema está dado nuevamente por la ecuación (3.1). Como ejemplo, se presentan resultados para un sistema de

4 Modelos Estudiados

 $N = L^2$ sitios, con L = 36 y $D/J = \frac{1}{2}$, con condiciones de contorno periódicas. En la *Figura* 4.1b se ofrece una representación gráfica de la red.



Figura 4.7: Configuraciones de mínima energía de la red triangular ferromagnética a T = 0: i) Fase Espiral (B/J = 0.04), ii) Fase stripe (B/J = 0.06), iii) Fase SkX (B/J = 0.12) y Fase SkX a campos grandes (B/J = 0.3).

Comenzamos con la descripción de las fases magnéticas clásicas a T = 0 en función del campo magnético externo. Encontramos que el sistema adopta una Fase Espiral para $0 < B/J \leq 0.04$. Para $0.07 \leq B/J \leq 0.3$ la configuración del sistema es una red de Skyrmiones denominada en la literatura como SkX [3] debido a que presenta una estructura tipo cristal (periódica). Esta fase puede construirse como una superposición de tres ondas planas (espirales) en tres direcciones no equivalentes, cada una con su propio vector de onda k[17]. A medida que aumenta el campo externo, el radio de los Skyrmiones disminuye y el parámetro de red de la red de Skyrmiones se hace cada vez mayor. Entre $B/J \approx 0.04$ y $B/J \approx 0.07$ el sistema adopta una fase intermedia de dominios tipo stripe (ver Figura 4.7(ii)). La fase completamente polarizada se alcanza para $B/J \approx 0.33$, encontrando entre esta fase y la fase SkX Skyrmiones aislados. Una representación gráfica de las fases que adopta el sistema para distintos campos B puede encontrarse en la Figura 4.7. La quiralidad total χ_L toma valores distintos de cero en la fase SkX (ver Figura 4.8).

Usando las configuraciones clásicas obtenidas por métodos numéricos, hacemos un desarrollo identico al que hicimos con la red cuadrada. En la *Figura* 4.8 mostramos resultados para la magnetización (izquierda), magnetización local (derecha arriba) y quiralidad escalar escalar total (derecha abajo) en función del campo magnético externo y varias magnitudes del espin $s = 1/2, \ldots, 10$.

Como primera observación se destaca que en todo el rango del campo externo, las fluctuaciones cuánticas no modifican estas cantidades de manera apreciable, incluso en el límite de mayor intensidad (s = 1/2). En los tres gráficos se muestra el límite clásico de la cantidades en línea roja a trazos. Este comportamiento era esperable, al menos en estas cantidades, debido al carácter no frustrado de ambas redes.

A continuación presentamos los cálculos de la ocupación local y propiedades espaciales de la función de onda de los estados excitados. La ocupación local $\langle n_i \rangle_0$ en la Fase Espiral presenta una distribución homogénea. Sin embargo, al igual que en la red cuadrada, en presencia de Skyrmiones, la ocupación está localizada en la región donde se "enroscan" los momentos magnéticos. La diferencia principal es que ahora estamos en presencia de un arreglo compacto de Skyrmiones que se extiende por toda la red, por lo que la ocupación está extendida para campos pequeños y aisla-



Figura 4.8: Valor medio de la magnetización por sitio (izquierda), la magnetización local media por sitio (derecha, arriba) y la quiralidad por plaqueta (derecha, abajo) vs. B/J, en la red triangular ferromagnética, para distintos valores de s. Encontramos que la quiralidad total χ_L toma valores distintos de cero en la fase SkX.

da para campos grandes, para los cuales los Skyrmiones comienzan a separarse (ver Figura 4.9). Este comportamiento sugiere que el campo magnético externo puede emplearse para controlar (localizar o deslocalizar) la distribución de bosones en el estado fundamental.

El órden en todos los casos es robusto frente a fluctuaciones cuánticas para todos los valores de s estudiados.



Figura 4.9: Ocupación media $\langle n_i \rangle_0$ en el estado fundamental para la Fase SkX a campo B/J = 0.12 (izquierda) y B/J = 0.3 (derecha), para s = 2 y s = 10 en ambos casos.

En cuanto a los estados excitados, encontramos que la ocupación media en los estados excitados tambien esta localizada en la región de máximo "enrollamiento" de los momentos magnéticos (ver *Figura* 4.10). Un resultado interesante es que a diferencia de lo que ocurre en la red cuadrada, la ocupación espacial de los primeros estados excitados muestran una clara simetría rotacional. Esta "degeneración" puede deberse a la mayor simetría de la red triangular respecto de la red cuadrada.

En la Figura 4.11 se muestra el módulo cuadrado y el argumento (fase) del overlap $\langle a_i \alpha_k^{\dagger} \rangle_0$ para los primeros dos modos de excitación de la fase SkX. Podemos ver que

4 Modelos Estudiados

los estados excitados son estados deslocalizados para campos bajos y localizados para campos altos.



Figura 4.10: Ocupación media en para los primeros cuatro modos de excitación en la fase SkX a campo B/J = 0.12 (izquierda) y B/J = 0.3 (derecha), para S = 10.

Un comportamiento interesante se puede apreciar de la Figura 4.11 analizando simultaneamente la fase y el módulo del *overlap*. Se ve claramente que alrededor de cada Skyrmion el *overlap* toma la forma

$$\langle a_i \alpha_k^{\dagger} \rangle_0 \propto \rho(r, \phi) e^{im \cdot \phi} ,$$

$$\tag{4.3}$$

donde ρ es el módulo del *overlap*, m es un entero y (r, ϕ) es un sistema de coordenadas con el origen en el centro del Skyrmion. Esto sugiere que pueden existir estados excitados con $\rho = \rho(r)$ y momento angular orbital m bien definido. Nuevamente, para confirmar esto es necesario calcular el valor de expectación del momento angular, no incluido en este trabajo.

En resúmen, en este modelo la región de skyrmiones presenta un comportamiento particular en función del campo magnético. Por un lado, debido al cambio de la localización bosónica dentro de la fase de Skyrmiones, se espera una mayor movilidad de los bosones en el estado fundamental a campos bajos que a campos altos. Esto puede tener consecuencias en propiedades de transporte como puede ser en el transporte térmico, en donde la estructura de bandas juega un rol fundamental [27].

Por otro lado, del *overlap* (*Figura* 4.11), dentro de la región de Fase de Skyrmiones, la distribución espacial tiene cierta simetría para todos los estados excitados estudiados, sin embargo, un comportamiento periódico en la fase de la función de onda puede tener consecuencias en el cálculo de otras cantidades, como puede ser la vorticidad (circulación), no calculada en este trabajo.



Figura 4.11: Módulo al cuadrado y argumento complejo (fase) del overlap para los primeros dos modos de excitación en la fase SkX a campo B/J = 0,12 (arriba) y B/J = 0,3 (abajo), para S = 10.

4.3 Red Triangular Antiferromagnética

El tercer modelo estudiado es la red triangular antiferromagnética. Se presentan resultados para un sistema de $N = L^2$ sitios, con L = 48 y $D/J = \frac{1}{2}$, con condiciones de contorno periódicas. Este sistema, en un tratamiento clásico, adopta una configuración mucho más novedosa formada por tres redes triangulares de Skyrmiones interpenetradas, denominada AF-SkX. Esta fase puede ser entendida, en analogía con la fase SkX del caso ferromagnético, como la superposición de tres espirales en cada subred [4].

En base a los resultados para el caso clásico a T = 0 obtenidos, encontramos que para $0.0 < B/J \leq 2.0$ el sistema adopta una configuración en espiral, seguida de la configuración AF-SkX para $2.0 \leq B/|J| \leq 5.2$. Para $5.2 \leq B/|J|$ el sistema adopta configuraciones con estructuras tipo vórtice en cada subred. Nos referimos a esta fase como HF (*highfield*).

En la Figura 4.12 se muestra una representación gráfica de las fases del sistema a T = 0. Notamos que a diferencia de lo que pasa en el caso ferromagnético, no hay una fase intermedia entre la Fase Espiral y la Fase de Skyrmiones, la quiralidad total χ_L presenta un comportamiento más abrupto entre ambas fases.

Encontramos que el comportamiento de este sistema difiere considerablemente del caso ferromagnético. Para empezar, el valor medio de la ocupación $\langle n_i \rangle_0$ toma valores mucho mayores que en el caso ferromagnético, por lo que la validez de la teoría lineal de ondas de espín debe ser evaluada en cada caso por separado. En particular, en el caso s = 1/2, la ocupación media en cada sitio supera al valor del espín para $3.2 \leq B/J \leq 5.6$, volviendo inválida la aproximación lineal de ondas de spin (recordemos que debe cumplirse que $n_i \ll 2s$). Así, como consecuencia de

4 Modelos Estudiados



Figura 4.12: Configuraciones de mínima energía por subred de la red triangular antiferromagnética a T = 0: i) Fase Espiral (B/J = 1,0), ii) Fase AF-SkX (B/J = 4,6), iii) Fase HF (B/J = 6,1). iv) Red completa: Fase AF-SkX (B/J = 2,6).

las fluctuaciones, se reduce la región de Skyrmiones y aparece una región en donde las fluctuaciones cuánticas destruyen completamente el órden clásico. Esto abre la posibilidad de que el estado cuántico sea un estado sin análogo clásico.

El efecto de las fluctuaciones cuánticas se evidencia en el comportamiento de la magnetización total (*Figura* 4.13 izquierda) y en mayor medida en la magnetización local (*Figura* 4.13 derecha, arriba) y quiralidad (*Figura* 4.13 derecha, abajo). Claramente, estas cantidades presentan un comportamiento muy distinto del caso no frustrado.



Figura 4.13: Valor medio de la magnetización por sitio (izquierda), la magnetización local media por sitio (derecha, arriba) y la quiralidad por plaqueta (derecha, abajo) vs. B/J, en la red triangular antiferromagnética, para varios valores de s. El recuadro azul marca la región donde la teoría lineal de ondas de espín falla para s = 1/2.

En cuanto a la distribución espacial de la ocupación, a medida que disminuye la magnitud del espín (aumentan las fluctuaciones), la distribución bosónica se va localizando hacia el centro del Skyrmion como se puede observar en la *Figura* 4.14. Esto se diferencia del caso ferromagnético donde la ocupación se localizaba en el borde para todo s. Como la configuración está dada por tres redes de Skyrmiones interpenetradas, la ocupación está extendida por toda la red. Sin embargo, para la fase HF encontramos que la ocupación está fuertemente localizada en el centro de los vórtices para todo valor de s en cada subred, lo que implica que en la red completa la ocupación tambien esté concentrada (ver *Figura* 4.15).



Figura 4.14: Ocupación media en el fundamental en la fase AF-SkX a campo B/J = 3,6para s = 1 (izquierda) y s = 7/2 (derecha).



Figura 4.15: Ocupación media en el fundamental en la fase HF a campo B/J = 5,7 para s = 1 (izquierda) y s = 7/2 (derecha).

En cuanto a la distribución espacial de los estados excitados, la ocupación media presenta características similares a la ocupación media en el fundamental para las fases AF-SkX y HF (ver *Figuras* 4.16 y 4.17).

Mirando el módulo al cuadrado y fase del *overlap* observamos que las funciones de onda de los primeros modos de excitación en la fase AF-SkX tienden a estar más localizadas en el centro de los Skyrmiones de cada subred a medida que disminuye s. Para $s \gg 1/2$ la función de onda se extiende uniformemente por toda la red. El *overlap* en cada subred tiene la forma (4.3) alrededor de cada Skyrmion. Esto se muestra en las *Figuras* 4.18 y 4.19.

Para la fase HF sucede algo similar, las funciones de onda de los modos de excitación tienden a localizarse alrededor de los vórtices para s pequeño y extenderse uniformemente por toda la red para s grande (ver *Figuras* 4.20 y 4.21).

De la distribución espacial del overlap, vemos que a medida que disminuye el espín, la distribución espacial de la función de onda tiende a localizarse, volviendose inestable para s = 1/2. Esto lleva a que la región de Skyrmiones se vuelva inestable

4 Modelos Estudiados



Figura 4.16: Ocupación media en el primer excitado en la fase AF-SkX a campo B/J = 3,6 para s = 1 (izquierda) y s = 7/2 (derecha).



Figura 4.17: Ocupación media en el primer excitado en la fase HF a campo B/J = 5,7 para s = 1 (izquierda) y s = 7/2 (derecha).



Figura 4.18: Módulo al cuadrado y argumento complejo (fase) del overlap para el primer modo de excitación en la fase AF-SkX a campo B/J = 3.6 para s = 1.

para campos grandes dentro de esa región. Esto nos lleva a preguntarnos si es posible que en esa región, las fluctuaciones cuánticas puedan generar una nueva fase sin análogo clásico.



Figura 4.19: Módulo al cuadrado y argumento complejo (fase) del overlap para el primer modo de excitación en la fase AF-SkX a campo B/J = 3.6 para s = 7/2.



Figura 4.20: Módulo al cuadrado y argumento complejo (fase) del overlap para el primer modo de excitación en la fase HF a campo B/J = 5,7 para s = 1.



Figura 4.21: Módulo al cuadrado y argumento complejo (fase) del *overlap* para el primer modo de excitación en la fase HF a campo B/J = 5.7 para s = 7/2.

5 Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado la estabilidad de fases de Skyrmiones magnéticos en sistemas bidimensionales frente a fluctuaciones cuánticas. Para ello, hemos hecho uso de métodos numéricos para determinar las configuraciones de mínima energía de los sistemas estudiados y de la teoría de ondas de spin en la aproximación lineal para estudiar el efecto de las fluctuaciones cuánticas sobre estas configuraciones.

Encontramos que en los sistemas ferromagnéticos estudiados el efecto de las fluctuaciones cuánticas es despreciable incluso para el límite de fluctuaciones fuertes, s = 1/2, por lo que una descripción clásica de estos sistemas puede resultar adecuada para describir propiedades del estado fundamental como la magnetización y/o la quiralidad. Sin embargo, el comportamiento de la distribución bosónica espacial, tanto del estado fundamental, como de los estados excitados, presentan propiedades muy interesantes. Por un lado, localización bosónica en la región de máximo "enrollamiento" de los Skyrmiones y por otro lado, evidentes simetrías no triviales (simetrías $s, p, d \dots$) en los estados excitados que pueden ser caracterizados mediante el valor del operador momento angular o el cálculo de la circulación. Queda, como proyecto a futuro, cuantificar este comportamiento.

Para el caso de la red triangular antiferromagnética encontramos que una descripción usando la teoría lineal de ondas de spin es insuficiente en algunos casos, en particular el caso s = 1/2 donde se sospecha que el sistema adopta una configuración desordenada sin análogo clásico. También se encontró que a diferencia del caso no frustrado, la mayor localización se observa en el centro de los Skyrmiones, siendo el campo magnético un posible "mecanismo" para controlar la localización bosónica.

Bibliografía

- A. Fert, N. Reyren y V. Cros, "Magnetic skyrmions: Advances in physics and potential applications", *Nature Reviews Materials*, vol. 2, n.º 7, pág. 17031, 2017. DOI: 10.1038/natrevmats.2017.31.
- [2] N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J. E. Bickel, B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka y R. Wiesendanger, "Writing and deleting single magnetic skyrmions", *Science*, vol. 341, n.º 6146, págs. 636-639, 2013. DOI: 10.1126/ science.1240573.
- [3] S. Muhlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii y P. Boni, "Skyrmion lattice in a chiral magnet", *Science*, vol. 323, n.º 5916, págs. 915-919, 2009. DOI: 10.1126/science.1166767.
- [4] H. D. Rosales, D. C. Cabra y P. Pujol, "Three-sublattice skyrmion crystal in the antiferromagnetic triangular lattice", *Physical Review B*, vol. 92, n.º 21, pág. 214 439, 2015. DOI: 10.1103/physrevb.92.214439.
- [5] I. Dzyaloshinsky, "A thermodynamic theory of "weak" ferromagnetism of antiferromagnetics", Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. 4, n.º 4, págs. 241-255, 1958. DOI: 10.1016/0022-3697(58)90076-3.
- [6] T. Moriya, "Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism", *Physical Review Letters*, vol. 120, n.º 1, págs. 91-98, 1960. DOI: 10.1103/physrev. 120.91.
- [7] A. Auerbach, Interacting Electrons and Quantum Magnetism, ép. Graduate Texts in Contemporary Physics. Springer New York, 1994, nil. DOI: 10.1007/978-1-4612-0869-3.
- [8] T. Moriya, "New mechanism of anisotropic superexchange interaction", *Physical Review Letters*, vol. 4, n.º 5, 228–230, 1960. DOI: 10.1103/physrevlett.4.228.
- [9] N. Ashcroft, Solid state physics. New York: Holt, Rinehart y Winston, 1976, ISBN: 9780030839931.
- [10] A. L. Chernyshev y M. E. Zhitomirsky, "Spin waves in a triangular lattice antiferromagnet: Decays, spectrum renormalization, and singularities", *Physical Review B*, vol. 79, n.º 14, pág. 144 416, 2009. DOI: 10.1103/physrevb.79.144416.
- D. C. Cabra, C. A. Lamas y H. D. Rosales, "Quantum disordered phase on the frustrated honeycomb lattice", *Physical Review B*, vol. 83, n.º 9, pág. 094506, 2011. DOI: 10.1103/physrevb.83.094506.

- [12] A. Mulder, R. Ganesh, L. Capriotti y A. Paramekanti, "Spiral order by disorder and lattice nematic order in a frustrated heisenberg antiferromagnet on the honeycomb lattice", *Physical Review B*, vol. 81, n.º 21, pág. 214 419, 2010. DOI: 10.1103/physrevb.81.214419.
- [13] T. Holstein y H. Primakoff, "Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet", *Physical Review*, vol. 58, n.º 12, págs. 1098-1113, 1940. DOI: 10.1103/physrev.58.1098.
- [14] T. Skyrme, "A unified field theory of mesons and baryons", Nuclear Physics, vol. 31, n.º nil, págs. 556-569, 1962. DOI: 10.1016/0029-5582(62)90775-7.
- [15] —, "A new model for nuclear matter", Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, vol. 226, n.º 1167, págs. 521-530, 1954. DOI: 10.1098/rspa.1954.0272.
- [16] —, "A non-linear field theory", Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, vol. 260, n.º 1300, págs. 127-138, 1961. DOI: 10.1098/rspa.1961.0018.
- [17] A. Bogdanov y D. Yablonsky, "Thermodynamically stable "vortices" magnetically ordered crystals. the mixed state of magnets", *Sov. Phys. JETP*, vol. 68, pág. 101, ene. de 1989.
- [18] X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa e Y. Tokura, "Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal", *Nature*, vol. 465, n.º 7300, págs. 901-904, 2010. DOI: 10.1038/nature09124.
- [19] U. Al Khawaja y H. Stoof, "Skyrmions in a ferromagnetic bose–einstein condensate", *Nature*, vol. 411, n.º 6840, 918–920, 2001, ISSN: 0028-0836. DOI: 10. 1038/35082010.
- [20] G. De Matteis, L. Martina y V. Turco, "Skyrmion states in chiral liquid crystals", *Theoretical and Mathematical Physics*, vol. 196, n.º 2, 1150–1163, 2018, ISSN: 1573-9333. DOI: 10.1134/s0040577918080044.
- [21] J. H. Han, Skyrmions in Condensed Matter, ép. Springer Tracts in Modern Physics. Springer International Publishing, 2017, nil. DOI: 10.1007/978-3-319-69246-3.
- [22] P Bak y M. H. Jensen, "Theory of helical magnetic structures and phase transitions in mnsi and fege", *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 13, n.^o 31, págs. L881-L885, 1980. DOI: 10.1088/0022-3719/13/31/002.
- [23] J. Colpa, "Diagonalization of the quadratic boson hamiltonian", *Physica A:* Statistical Mechanics and its Applications, vol. 93, n.º 3-4, págs. 327-353, 1978.
 DOI: 10.1016/0378-4371(78)90160-7.
- [24] M.-w. Xiao, "Theory of transformation for the diagonalization of quadratic hamiltonians", *CoRR*, 2009. arXiv: 0908.0787 [math-ph].

- [25] A. Roldán-Molina, M. J. Santander, A. S. Nunez y J. Fernández-Rossier, "Quantum fluctuations stabilize skyrmion textures", *Physical Review B*, vol. 92, n.º 24, pág. 245 436, 2015. DOI: 10.1103/physrevb.92.245436.
- [26] D. P. Landau y K. Binder, A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. Cambridge university press, 2014.
- [27] A. Mook, J. Henk e I. Mertig, "Edge states in topological magnon insulators", *Physical Review B*, vol. 90, n.º 2, 2014, ISSN: 1550-235X. DOI: 10.1103/physrevb. 90.024412.

APÉNDICE A: MÉTODO AUTOCONSISTENTE

El método autoconsistente se basa en la aproximación de campo medio.

Suponemos que cada espín S_i de la red interactúa con sus vecinos a través de un campo efectivo h_i .

La energía por sitio es mínima cuando cada espín S_i esta alineado con el campo h_i . La idea del método es recorrer la red de forma aleatoria, alineando cada espín S_i con el campo h_i .

Como el campo h_i a su vez depende de la configuración de la red, se espera llegar a una configuración donde S_i esta alineado a h_i en cada sitio, o hasta que el cambio en la energía ΔE sea menor a una cota ϵ preestablecida.

\mathbf{A}	lgoritmo	1:	Método	A	Autoconsistente.
--------------	----------	----	--------	---	------------------

1 Inicializar la Red en una configuración aleatoria 2 Calcular la energía E_0 del sistema 3 repetir 4 | hacer N_{sitios} veces 5 | Sortear aleatoreamente un sitio i6 | Calcular $h_i = \sum_j J S_j + D r_{ij} \times S_j + S_i^z \hat{k} + B$ /* j vecinos de i */ 7 | $S_i \leftarrow h_i / ||h_i||$ 8 | Calcular el cambio en energía ΔE 9 hasta que $\Delta E < \epsilon$

Este método resulta de gran utilidad debido a su rápida convergencia en un gran número de casos y sus escaso costo computacional. Aún así el método posee sus desventajas. Existe la posibilidad de que el sistema se quede en una configuración que es un mínimo local de la energía. En el caso de sistemas donde esto suceda, se debe recurrir a métodos más robustos.