



Universidad Nacional de La Plata
Facultad de Ciencias Exactas

Tesis de Licenciatura en Física
EFECTO DE INTERACCIONES COMPETITIVAS TIPO RKKY
EN SISTEMAS MAGNÉTICOS

Atilio Vela Wac

Director: Dr. Daniel Cabra
Co-Directora: Dra. Flavia Gómez Albarracín

LA PLATA, ARGENTINA
- MARZO DE 2021-

Resumen

En este trabajo el objetivo principal es el estudio de la competencia entre la interacción de intercambio a primeros vecinos y acoplamientos efectivos tipo RKKY, cuyo origen es la interacción con electrones itinerantes, para espines tipo Ising en una red cuadrada. La interacción tipo RKKY es, en principio, de largo alcance, y depende del momento de Fermi de los electrones itinerantes y de la constante de acoplamiento de la interacción RKKY. Este modelo, dependiendo de los parámetros elegidos, puede presentar frustración magnética.

Para poner el foco en zonas donde el efecto de las interacciones RKKY sea más fuerte, se variaron parámetros alrededor de los valores para los que la constante de intercambio efectiva a primeros vecinos (fruto de la suma de la constante de acoplamiento directo y de la RKKY) se anula. Se analizaron numéricamente las fases de baja temperatura, utilizando el algoritmo de Monte Carlo Metrópolis. Con esta técnica, se estudió primeramente un modelo tomando interacciones RKKY hasta terceros vecinos. Construyendo los parámetros correspondientes, se encontraron fases conocidas en otros modelos de la red cuadrada, como fases ordenadas de tipo Néel, ferromagnética y colineal [1]. En este trabajo se denominará a esta última fase como “stripes 1_1”.

De particular interés fue el caso en el que ambos acoplamientos son antiferromagnéticos, donde además se estudió el efecto de un campo magnético externo. Se observaron diferentes fases y plateaux de magnetización para $m = 0$ y $m = \frac{1}{3}$ para distintos valores de la constante de acoplamiento RKKY y se vió que el sistema no parece ordenarse para algunos valores de la constante y a campo $B = 0$. A partir de este resultado, se decidió incluir acoplamientos RKKY a mayores distancias, considerando hasta quintos vecinos y se obtuvo un interesante diagrama de fases de baja temperatura, que presenta una plétora de plateaux de magnetización para $m = 0$, $m = \frac{1}{3}$, $m = \frac{1}{2}$ y $m = \frac{5}{9}$.

Abstract

In this work we study the competition between the nearest neighbors exchange interaction and effective RKKY couplings, whose origin is the interaction with itinerant electrons, for Ising spins in a square lattice. The RKKY-type interaction is, in principle, long-range, and depends on the Fermi momentum of the itinerant electrons and the coupling constant of the RKKY interaction. This model, may present magnetic frustration, depending on the parameters chosen.

To focus on areas where the effect of the RKKY interactions is stronger, we vary the parameters around the values for which the nearest neighbors effective exchange constant (the result of the sum of the direct and the RKKY coupling constants) vanishes. We analyze the low temperature phases numerically, using the Monte Carlo Metropolis algorithm. With this technique, we study first a model taking RKKY interactions up to third neighbors. By constructing the corresponding parameters, we find known phases in other models of the square lattice, such as ordered phases of Néel type, ferromagnetic and collinear [1]. In this work, we name this last phase as “stripes 1_1”.

Of particular interest was the case in which both couplings are antiferromagnetic, where in addition we study the effect of an external magnetic field. We observe different phases and plateaux of magnetization for $m = 0$ and $m = \frac{1}{3}$ for different values of the RKKY coupling constant and we saw that the system does not seem to order itself for some values of the constant and with field $B = 0$. From this result, we decide to include RKKY couplings at greater distances, considering up to fifth neighbors and we obtain an interesting low-temperature phase diagram, which presents a plethora of magnetization plateaux for $m = 0$, $m = \frac{1}{3}$, $m = \frac{1}{2}$ and $m = \frac{5}{9}$.

A toda persona que defienda la Universidad Pública,
que luche por el sistema científico nacional,
y que reconozca un valor cultural en este escrito.

Agradecimientos

A mis cuatro abueles, nacidos en familias humildes, por haber dedicado toda su vida a progresar para que sus descendentes tuviéramos todas las oportunidades que se requieren para lograr una vida digna. En particular a mi abuelo Atilio, con quién por muy poco no llegué a compartir este momento, a quién siempre lo hicieron feliz mis logros.

A mis padres, por haber aprovechado esas oportunidades, por criarme con mucho amor y paciencia, por enseñarme todo lo que saben, por estar para todo lo que necesito.

A mis hermanos, por el apoyo constante y la paciencia en los momentos de mayor estrés.

A Nati, por acompañarme en todo y por hacer que todo sea un poco (mucho) mejor.

A Lau, Juan, Santi, Javi, Colo, Kaslu, Esti, Mati y Luci, por todos los momentos vividos en los últimos años, los mates, las partidas interminables de bases en el pastito, las tardes y noches enteras de estudio y los catanes en el depto de 47.

A mis tías Laura y Sandra, por su amor incondicional. A mis primos, por su apoyo y su confianza.

A Gasty y el Chino, por estar siempre que los necesito.

A Elina y a Jorge, que sin ser familia de sangre, me apoyan en todo lo que hago.

A Flavia y Daniel, por el apoyo, por la paciencia, y por la predisposición a lo largo del trabajo.

Índice general

Resumen	iii
Abstract	v
Agradecimientos	ix
1. Introducción	1
2. Modelo y método	3
2.1. Modelo de Ising	3
2.1.1. Sistemas de espines frustrados	4
2.2. Modelo de interacciones competitivas de intercambio directo y RKKY	7
2.3. Método Monte Carlo con algoritmo de Metrópolis	8
2.3.1. Cadenas de Markov	9
2.3.2. Algoritmo de Metrópolis	9
3. Resultados y Discusión	11
3.1. Acoplamiento directo ferromagnético ($J = -1$)	12
3.1.1. Caso $k_F = \pi$	12
3.1.1.1. $J_{\text{RKKY}} < 1$	13
3.1.1.2. $J_{\text{RKKY}} \geq 1$	14
3.1.2. Caso $k_F = \frac{\pi}{2}$	15
3.1.2.1. $J_{\text{RKKY}} < -1$	16
3.1.2.2. $J_{\text{RKKY}} = -1$	17
3.1.2.3. $J_{\text{RKKY}} > -1$	18
3.2. Acoplamiento directo antiferromagnético ($J = 1$)	19
3.2.1. Caso $k_F = \pi$	19
3.2.2. Caso $k_F = \frac{\pi}{2}$	21
3.2.2.1. Acoplamiento RKKY hasta terceros vecinos	22
3.2.2.2. Acoplamiento RKKY hasta quintos vecinos	26
4. Conclusiones	31

Capítulo 1

Introducción

El estudio del fenómeno de orden y desorden es fundamental en materiales magnéticos. Se ha hecho un gran esfuerzo por entender los mecanismos responsables del orden espontáneo y la naturaleza de las transiciones de fase en todo tipo de sistema.

En los últimos cuarenta años se ha prestado mucha atención a modelos frustrados [2]. La palabra “frustración” ha sido introducida para describir la situación en la que uno o más espines en un sistema no pueden ser orientados de forma tal que se minimice la energía de todas las interacciones entre espines [3]. Las frustraciones pueden ser causadas por interacciones competitivas o por la estructura de la red (como detallaremos en el segundo capítulo). Los efectos de frustración son interesantes y usualmente inesperados.

En los sistemas magnéticos fuertemente correlacionados, la frustración magnética [4, 5, 6] conduce generalmente a fases y propiedades exóticas a bajas temperaturas. Se pueden distinguir diferentes tipos de frustración, como la geométrica, o las causadas por distintos tipos de interacciones competitivas. Un ejemplo típico de este último caso es la competencia de interacciones de intercambio antiferromagnéticas en una red cuadrada, que por ser bipartita no presenta frustración en el modelo a primeros vecinos. Como se discutirá en el segundo capítulo, la introducción de un acoplamiento de intercambio a segundos vecinos “frustra” al sistema. En este sentido, es posible también introducir frustración a través de otro tipo de interacciones, como la anisotropía por bonds o la local, o antisimétricas, como la de Dzyaloshinskii-Moriya [7, 8]. Existen también interacciones de largo alcance, como las interacciones dipolares (relevantes por ejemplo para sistemas frustrados como los llamados “hielos de espín” [9, 10, 11]), o las de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida, también llamadas (RKKY) [12, 13, 14].

En la interacción RKKY, los momentos magnéticos interactúan a través de electrones de conducción, generándose un acoplamiento de intercambio indirecto. Este tipo de fenómeno puede realizarse experimentalmente por ejemplo considerando un film magnético sobre una superficie metálica. En su trabajo inicial en 1954 [12], M. A. Ruderman y C. Kittel calcularon el acoplamiento indirecto entre dos momentos magnéticos nucleares en un metal a través de la interacción hiperfina con los electrones de conducción, que parecía explicar cualitativamente las líneas de resonancia nuclear observadas en la plata natural. Dos años más tarde, T. Kasuya [13] consideró la interacción entre electrones de conducción y espines de electrones d , mostrando que daban lugar, bajo ciertas condiciones, a interacciones de intercambio de largo alcance. Un año después, en 1957, K. Yosida [14] también retomó interacciones de este tipo para estudiar la interacción en las aleaciones CuMn.

Desde entonces, numerosos trabajos han tenido en cuenta este tipo de interacciones. Recientemente, la interacción RKKY se ha propuesto como posible forma de estabilizar estructuras magnéticas con topología no trivial llamadas skyrmiones [15], de gran potencial

tecnológico [16]. Específicamente, se ha propuesto como mecanismo de estabilización de este tipo de fases en materiales magnéticos con electrones $4f$, que por tener estructura hexagonal centrosimétrica no poseen interacciones tipo Dzyaloshinskii-Moriya [7, 8]. Teóricamente, se estudiaron primero estas interacciones, para estabilizar esta clase de fases, aproximándolas como de alcance finito [17]. Más recientemente, teniendo en cuenta la “verdadera” naturaleza de la interacción, que es de largo alcance, se ha visto que estas interacciones estabilizan un skyrmion en una monocapa magnética sobre un substrato no conductor [18]. Asimismo, S. Hayami et al. [19] han construido un modelo efectivo a partir de la interacción RKKY que captura la inestabilidad hacia estados múltiple-Q descubierta en magnetos itinerantes, mostrando que la introducción de un campo magnético externo induce una variedad de estados exóticos múltiple-Q.

En este trabajo se consideró un término de acoplamiento RKKY que modela las interacciones entre espines mediadas por electrones en la banda de conducción:

$$\mathcal{H}_{\text{RKKY}} = J_{\text{RKKY}}(2k_F a)^3 \sum_{\Delta} \mathcal{F}(\Delta) S_i S_{i+\Delta}, \quad (1.1)$$

donde J_{RKKY} es la constante de acoplamiento RKKY, k_F es el momento de Fermi de los electrones itinerantes, a es el parámetro de red, Δ es la distancia entre sitios, $\mathcal{F}(\Delta)$ es una función adimensional que determina la dependencia de la interacción con la distancia entre espines (Δ) y S_i es el espín en el sitio i . El valor del vector de onda de Fermi se define a partir de la energía del último estado ocupado por los electrones de la banda de conducción en el estado fundamental, es decir, depende del material. La función $\mathcal{F}(\Delta)$ para electrones libres puede modelarse como [12]:

$$\mathcal{F}(\Delta) = \frac{\cos(2k_F \Delta)}{(2k_F \Delta)^3} - \frac{\sin(2k_F \Delta)}{(2k_F \Delta)^4}. \quad (1.2)$$

Otro campo novedoso y de reciente interés donde las interacciones RKKY han cobrado importancia es en los materiales ferroeléctricos. En el 2019, F. Jin et al.[20] han explorado la transición ferroeléctrica en el material LiOsO_3 a través de la técnica de espectroscopía de Raman. Las distorsiones ferroeléctricas en un material se consideraban experimentalmente inaccesibles porque los electrones apantallarían las interacciones de Coulomb (de largo alcance) que favorecerían una estructura polar. Según P.W. Anderson y E. I Blount [21] la transición de una fase paraeléctrica a una ferroeléctrica sería posible para un metal solo si en la fase paraeléctrica los electrones en el nivel de Fermi estuvieran desacoplados de los fonones ópticos transversos. En el trabajo de F. Jin et al, combinando la técnica de Raman con medidas de magnetotransporte, han demostrado una activa conexión entre electrones itinerantes y el orden ferroeléctrico, dando lugar a una transición más gradual en LiOsO_3 . En el mismo trabajo, también han mostrado que, para la interacción entre dipolos eléctricos σ , integrando los electrones del modelo, se obtiene una interacción efectiva similar a la RKKY:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij} + J_{ij}^c) \sigma_{i+\delta}^z \sigma_{j+\delta}^z, \quad (1.3)$$

donde $J_{ij}^c = [2k_F \Delta_{ij} \cos(2k_F \Delta_{ij}) - \sin(2k_F \Delta_{ij})]/\Delta_{ij}^4$ es la interacción dipolo-dipolo efectiva mediada por electrones itinerantes. Dependiendo de la distancia entre dipolos, puede ser ferroeléctrica ($J_{ij}^c > 0$) o antiferroeléctrica ($J_{ij}^c < 0$).

Motivado por la importancia de las interacciones RKKY, en los diversos campos de la materia condensada, como interacción competitiva que puede generar frustraciones en los distintos modelos, en este trabajo se estudia el efecto de interacciones RKKY en el modelo de Ising en la red cuadrada.

Capítulo 2

Modelo y método

En este capítulo se repasa primero el modelo de Ising y los conceptos de parámetro de orden y de sistemas de espines frustrados. Luego, se presenta el modelo de interacciones competitivas utilizado en este trabajo de diploma. Finalmente, se repasa el método Monte Carlo con el algoritmo de Metrópolis, que se utilizó para realizar las simulaciones del modelo propuesto.

2.1. Modelo de Ising

El modelo de Ising es el modelo magnético para sólidos aislantes más estudiado. Una de sus cualidades más importantes es que tiene solución exacta para una y dos dimensiones en la red cuadrada [22]. En dicho modelo se considera una red n -dimensional periódica ($n = 1, 2, 3$), se asocia a cada sitio (i) de la red un momento magnético o espín $S_i = 1(-1)$, y se dice que su orientación es up(down) [23]. Para un dado conjunto $\{S_i\}$ de espines, se define la interacción entre éstos a través del Hamiltoniano:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (2.1)$$

donde J es la constante de intercambio en unidades de energía y $\langle i, j \rangle$ indica suma sobre pares de espines primeros vecinos

El modelo de Ising 2D, a diferencia del caso unidimensional, presenta una transición de fase desde un estado desordenado a alta temperatura (paramagnético) a un estado ordenado [24, 25]. Este orden, por debajo de una temperatura crítica, dependerá del signo de la constante de acoplamiento J . Cuando la constante de acoplamiento es negativa, del Hamiltoniano de la ecuación 2.1 se puede ver fácilmente que el mínimo de energía corresponde a una configuración de espines todos alineados (orden ferromagnético). Esto es válido para cualquier red que se considere. Por otro lado, si J es positiva, en la red cuadrada el mínimo de energía corresponde a espines orientados de manera opuesta a sus primeros vecinos (Fig. 2.1), definiendo el orden antiferromagnético o de Néel [26, 27]. Para otros tipos de redes, como la triangular, con constante $J > 0$, el modelo de Ising presenta frustración, como se discute en la siguiente sección, y su estado fundamental está degenerado [28].

Las transiciones de fase del modelo de Ising son de segundo orden (o continuas) y son caracterizadas por algún parámetro de orden que se elige de forma tal que sea nulo en la fase paramagnética y no nulo en la fase ordenada. Para el caso ferromagnético, el parámetro de orden es simplemente la magnetización por espín:

$$m\{S_i\} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (2.2)$$

mientras que para el orden antiferromagnético en la red cuadrada, con $L^2 = N$ espines, el parámetro de orden es la “magnetización alternada”:

$$\Phi_1\{S_i\} = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^L (-1)^{i+j} S_{ij}. \quad (2.3)$$

Notemos que en ambos casos los parámetros de orden valen ± 1 en la fase ordenada correspondiente.

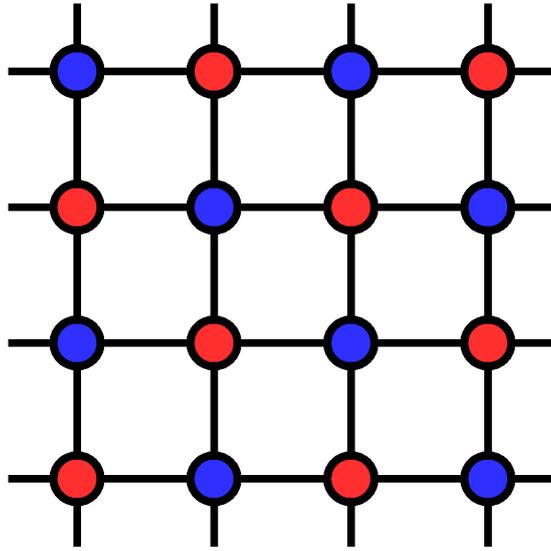


Figura 2.1. Arreglo de espines que minimizan la energía en el modelo de Ising antiferromagnético en la red cuadrada, llamado orden de Néel. En rojo los espines up ($S = 1$), en azul los espines down ($S = -1$).

2.1.1. Sistemas de espines frustrados

Un concepto importante para entender cómo se comportan los sistemas magnéticos a baja temperatura es el de frustración. Se dice que un sistema está frustrado cuando su energía mínima no corresponde a una configuración de espines en la cual cada acoplamiento de pares se encuentra en su mínimo de energía [4]. Por ejemplo, en el modelo de Ising antiferromagnético ($J > 0$ en el Hamiltoniano de la ecuación 2.1) en la red triangular (Fig. 2.2), para minimizar la energía entre pares de espines de primeros vecinos, los espines deben tener orientaciones opuestas. Pero si dos espines adyacentes de la red se orientan de forma opuesta, el tercer espín de la plaqueta triangular no puede orientarse de forma tal que el acoplamiento con los otros dos espines contribuya negativamente a la energía. Por lo tanto, el sistema está frustrado.

Pueden definirse dos tipos de frustración. Cuando ésta se debe puramente a la geometría de la red, se dice que es una *frustración geométrica* [30], como en el ejemplo de la red triangular. Cuando es causada por competencia de interacciones, como podría ser en la red cuadrada con interacciones antiferromagnéticas a primeros (J_1) y segundos vecinos (J_2) (se indican las interacciones en la Fig. 2.3), se dice que es una *frustración magnética*.

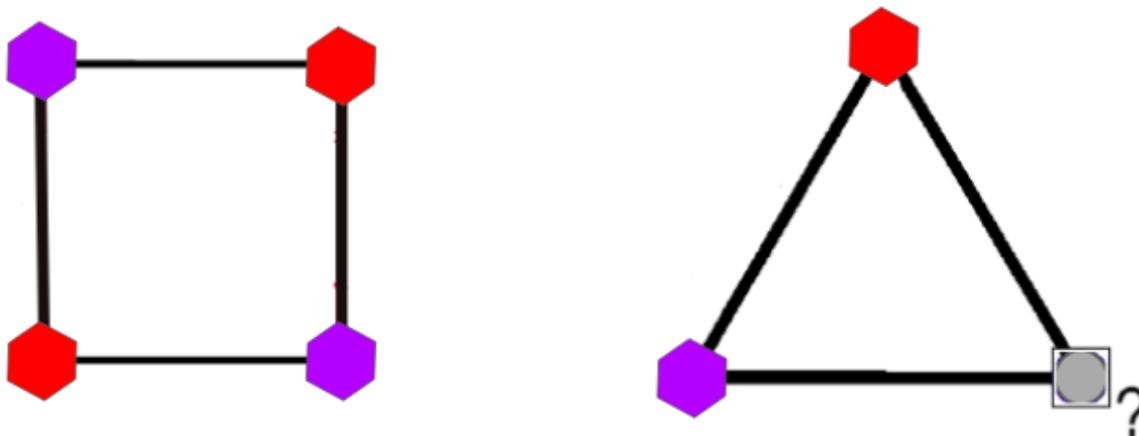


Figura 2.2. Arreglo de espines que minimizan la energía para interacciones antiferromagnéticas a primeros vecinos. A la izquierda, en la red cuadrada los espines se acomodan en el estado de Néel. A la derecha, en la red triangular es imposible que los tres espines se dispongan de tal manera de minimizar todas las interacciones, mostrando un ejemplo de frustración geométrica.

En el caso de la red cuadrada, para espines tipo Ising, en el modelo J_1J_2 con interacciones antiferromagnéticas, para $J_1/J_2 > 2$ se obtiene que el estado fundamental es de tipo Néel, y si $J_1/J_2 < 2$ es de tipo stripes 1_1; una fase formada por líneas horizontales (o verticales), una de espines orientados down cada una de espines orientados up, como se observa en la Fig. 2.4. Se presenta el diagrama de fases del modelo en la Fig. 2.5, tomado de Ref. [1], donde se observa que para $J_1/J_2 < 2$, la temperatura crítica aumenta al disminuir el cociente J_1/J_2 , y en cambio para $J_1/J_2 > 2$ la temperatura crítica aumenta con el cociente entre los acoplamientos. Además, para $J_1/J_2 = 2$, se encuentra el punto crítico en el cual la temperatura crítica tiende a $T_c = 0$, es decir que, a cualquier temperatura, el sistema se encuentra en fase paramagnética.

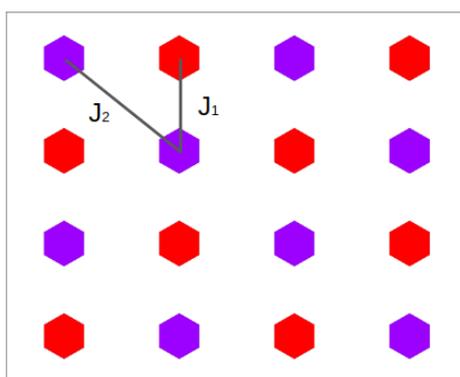


Figura 2.3. Configuración de espines en la red cuadrada con interacciones a primeros y segundos vecinos antiferromagnéticas (J_1J_2). Este modelo presenta frustración magnética.

En la siguiente sección se presenta el modelo utilizado en este trabajo, el cual presenta frustración magnética mediante interacciones efectivas tipo RKKY, de largo alcance. En el tercer capítulo se presenta el estudio de dicho modelo en la red cuadrada utilizando simulaciones de Monte Carlo, centrado en regiones de los parámetros donde la competencia entre la interacción de intercambio y de RKKY es más evidente.

2. Modelo y método

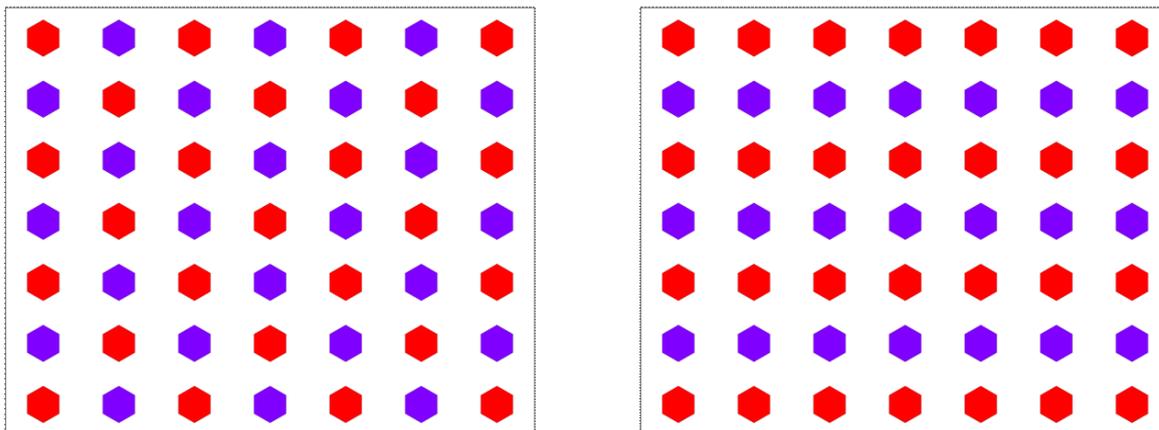


Figura 2.4. Configuraciones de espines del estado fundamental para un sistema de tipo Ising en la red cuadrada con interacción a primeros y segundos vecinos antiferromagnética. Los hexágonos rojos representan espines up ($S = 1$) y los azules espines down ($S = -1$). A la izquierda el estado de Néel que se obtiene para $J_1/J_2 > 2$ y a la derecha el orden stripes 1-1 para $J_1/J_2 < 2$.

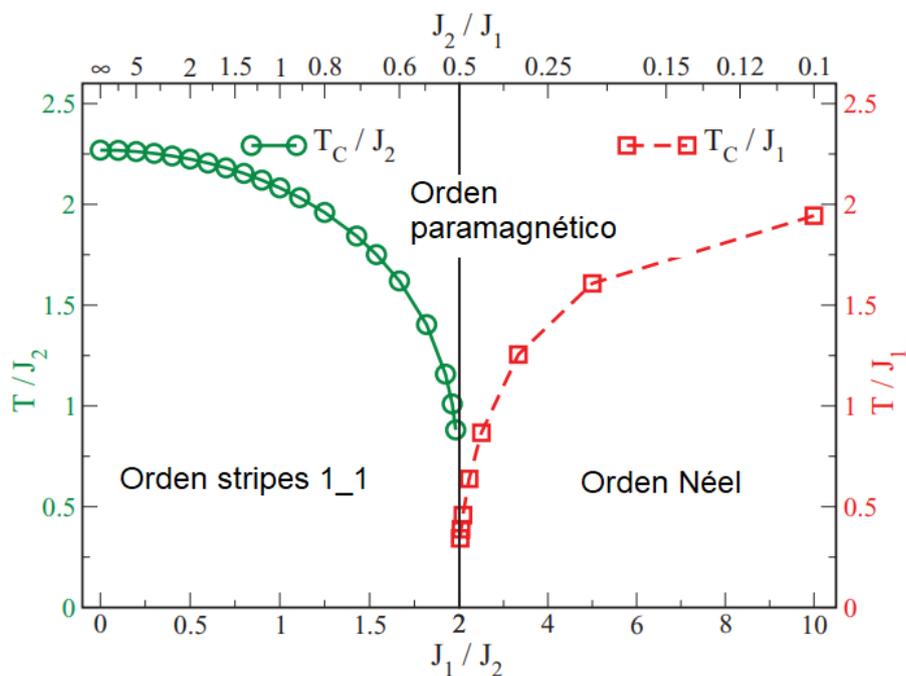


Figura 2.5. Diagrama de fases para el modelo de Ising en la red cuadrada con interacciones antiferromagnéticas J_1 y J_2 , a primeros y segundos vecinos. Figura tomada de Ref. [1].

2.2. Modelo de interacciones competitivas de intercambio directo y RKKY

El objetivo principal de este trabajo de diploma es el estudio del efecto de la competencia entre interacciones de intercambio a primeros vecinos e interacciones tipo RKKY. Para ello, se consideró un modelo en la red cuadrada de lado L y parámetro de red a . Se tomó un Hamiltoniano donde se incluyeron tres términos: uno de interacción directa entre espines a primeros vecinos (\mathcal{H}_0), otro de interacción indirecta tipo RKKY ($\mathcal{H}_{\text{RKKY}}$) y, por último, un término de interacción con un campo magnético externo (\mathcal{H}_B):

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{RKKY}} + \mathcal{H}_B \\ &= J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J_{\text{RKKY}} (2k_F a)^3 \sum_{\Delta} \mathcal{F}(\Delta) S_i S_{i+\Delta} - B \sum_i S_i, \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde J es la constante de acoplamiento directo, $\langle i, j \rangle$ indica la suma a primeros vecinos, J_{RKKY} es la constante de acoplamiento RKKY, k_F el vector de onda de Fermi, Δ es la distancia entre espines en unidades del parámetro de red a , B es el campo externo y $\mathcal{F}(\Delta)$ la modulación RKKY que se modela para electrones libres como:

$$\mathcal{F}(\Delta) = \frac{\cos(2k_F \Delta)}{(2k_F \Delta)^3} - \frac{\text{sen}(2k_F \Delta)}{(2k_F \Delta)^4}. \quad (2.5)$$

Se puede observar entonces que la interacción RKKY es de largo alcance, como se mencionó en la Introducción.

El valor de la modulación depende del vector de onda de Fermi de los electrones itinerantes, k_F , que es característico del material, ya que, como se mencionó anteriormente, depende del llenado de la banda de conducción. En este trabajo se estudiaron sistemas con dos valores fijos distintos para esta cantidad. Si tomamos por ejemplo los parámetros $k_F = \pi$ y $J_{\text{RKKY}} = 1$, se pueden calcular las constantes efectivas de segundos hasta quintos vecinos $J_2 = -0.32$, $J_3 = 0.125$, $J_4 = 0.001$, $J_5 = 0.023$ y a décimos vecinos $J_{10} = 0.01$. El valor de la constante a quintos y décimos vecinos es solo un orden de magnitud menor que a segundos y terceros vecinos y de mayor orden que a cuartos vecinos, por lo tanto podrían ser relevantes en el modelo.

El objetivo de este trabajo es estudiar las características principales del efecto de las interacciones RKKY en el modelo de Ising en la red cuadrada, y su competencia con la interacción de intercambio directo a primeros vecinos. En una primera aproximación, para ir más allá de las interacciones a segundos vecinos, que darían un modelo efectivo J_1 - J_2 , se consideran hasta terceros y, en algunos casos, hasta quintos vecinos, definidos en la Fig.2.6.

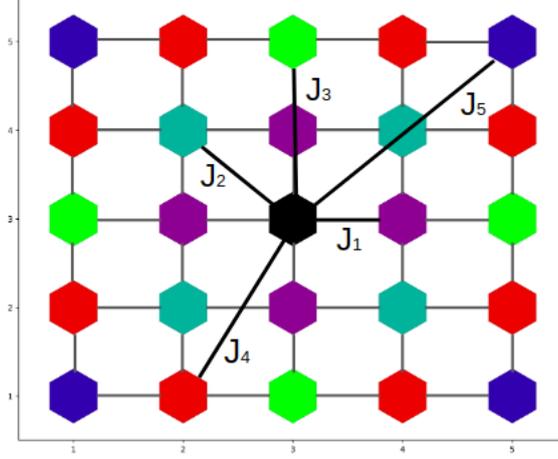


Figura 2.6. Interacciones hasta quintos vecinos en la red cuadrada. En negro el espín de referencia, en violeta los primeros vecinos, en celeste los segundos vecinos, en verde los terceros vecinos, en rojo los cuartos vecinos y en azul los quintos vecinos.

2.3. Método Monte Carlo con algoritmo de Metrópolis

El método utilizado para realizar las simulaciones del sistema es el conocido método de Monte Carlo para el que se eligió aplicar el algoritmo de Metrópolis. En esta sección se repasan las ideas principales.

En un sistema canónico en el equilibrio, las probabilidad de ocupación de un estado μ con energía E_μ viene dada por la probabilidad de distribución de Boltzmann:

$$p_\mu = \frac{e^{-\beta E_\mu}}{Z} = \frac{e^{-\beta E_\mu}}{\sum_\nu e^{-\beta E_\nu}}, \quad (2.6)$$

donde Z es la función de partición canónica y $\beta = \frac{1}{k_B T}$, siendo k_B la constante de Boltzmann.

Se pueden determinar los valores medios del calor específico por espín y la susceptibilidad magnética por espín del sistema, a través del teorema de fluctuación-disipación, como:

$$C_v = \frac{k_B \beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (2.7)$$

$$\chi = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2), \quad (2.8)$$

donde E es la energía total del sistema y $M = \sum_i S_i$ su magnetización total [31].

El objetivo principal del método es calcular el valor de expectación $\langle Q \rangle$ de alguna cantidad observable, como la energía interna o la magnetización. Para determinarlo se promedia el valor de dicha cantidad en cada estado pesado con su probabilidad de Boltzmann:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_\mu Q_\mu e^{-\beta E_\mu}}{\sum_\mu e^{-\beta E_\mu}}. \quad (2.9)$$

La técnica que se utiliza para aproximar esta cantidad consiste en tomar un subconjunto arbitrario de estados mediante una distribución de probabilidad $p_{\mu_i}^{-1}$. Se aproxima Q como:

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}, \quad (2.10)$$

donde $\{\mu_1, \dots, \mu_M\}$ es el subconjunto de estados elegido. Se denomina a Q_M el estimador de $\langle Q \rangle$ y se cumple que $Q_M \rightarrow \langle Q \rangle$ cuando $M \rightarrow \infty$.

Una forma de definir la distribución p_μ es por muestreo simple, es decir, escoger todos los estados con igual probabilidad, aunque de esta forma el estimador resulta ser poco preciso salvo para M grande, lo cual es poco eficiente computacionalmente. Usualmente la suma 2.10 es dominada por un número pequeño de estados, determinado por la distribución de Boltzmann.

En lugar del muestreo simple se suele utilizar el muestreo de importancia, que obedece la distribución de Boltzmann, es decir, $p_\mu = Z^{-1}e^{-\beta E_\mu}$. Sin embargo ahora se debe decidir cómo elegir los estados para que sean pesados según la probabilidad de Boltzmann correspondiente. En el siguiente apartado se presenta la solución estándar a este problema, que consiste en utilizar procesos de Markov.

2.3.1. Cadenas de Markov

Un proceso de Markov es un mecanismo que consiste en generar un estado ν a partir de un estado μ con una cierta probabilidad de transición $P(\mu \rightarrow \nu)$. Esta última debe ser independiente del tiempo y de la historia del sistema, es decir, que solo depende de los estados μ y ν , y se debe cumplir $\sum_\nu P(\mu \rightarrow \nu) = 1$. Notemos que $P(\mu \rightarrow \mu)$ no es necesariamente nula.

Una sucesión de procesos de Markov forman lo que se conoce como una **cadena de Markov**. Los procesos de Markov se eligen de forma tal que luego de una sucesión suficientemente grande de procesos, partiendo de un estado arbitrario, se producirá una sucesión de estados con probabilidades dadas por la distribución de Boltzmann. Para asegurar que esto se cumpla se piden las condiciones de **ergodicidad** y **balance detallado**.

La condición de ergodicidad es el requerimiento de que partiendo de un estado arbitrario, debe ser posible para la cadena de Markov alcanzar cualquier estado del sistema. Si algún estado fuera inaccesible tendría probabilidad nula y no p_ν como requiere la distribución de Boltzmann.

La segunda condición, el balance detallado, asegura que la distribución de probabilidades que alcanzamos cuando llegamos al equilibrio es la de Boltzmann. Lo primero que se debe asegurar es que el sistema transicione del estado μ al ν y al inverso igual cantidad de veces, en promedio. Para ello se pide:

$$p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) = p_\mu P(\mu \rightarrow \nu). \quad (2.11)$$

Si p_ν viene dada por la distribución de Boltzmann (2.6), 2.11 implica:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (2.12)$$

que es una condición sobre el cociente de las probabilidades de transición y puede ser satisfecha de muchas formas. Una forma simple de satisfacerla es:

$$P(\mu \rightarrow \nu) \propto e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\mu - E_\nu)}, \quad (2.13)$$

aunque esta elección no es muy buena, como se explica en el siguiente apartado. Se verá también que una forma más eficiente de satisfacerla es mediante la variante de Metrópolis.

2.3.2. Algoritmo de Metrópolis

Una forma de satisfacer la condición de balance detallado es el algoritmo de Metrópolis. Se puede descomponer la probabilidad en dos factores:

2. Modelo y método

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu), \quad (2.14)$$

siendo $g(\mu \rightarrow \nu)$ la probabilidad de selección, que es la probabilidad de que dado un estado inicial μ el algoritmo genere un estado objetivo ν , y $A(\mu \rightarrow \nu)$ el radio de aceptación, que es la probabilidad de aceptar la transición del estado inicial al estado objetivo.

Para un modelo de red cuadrada con una componente de espín, se suelen aceptar transiciones de estado que impliquen girar un solo espín y se elige $g(\mu \rightarrow \nu)$ tal que tenga el mismo valor para cada una de estas transiciones. De esta forma, de 2.12 y 2.14 se obtiene:

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (2.15)$$

Una forma de satisfacer esta condición, como se menciona en el apartado anterior, es eligiendo:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (2.16)$$

donde A_0 es una constante que debe cumplir $A_0 \leq e^{-\beta z J}$, siendo z el número de primeros vecinos. Sin embargo, aunque eligieramos el mayor valor de A_0 posible ($A_0 = e^{-\beta z J}$), el algoritmo sería ineficiente, porque el radio de aceptación es muy pequeño para casi cualquier movida.

Un algoritmo eficiente, que cumple con la condición 2.12, es el algoritmo de metrópolis, que se define a partir del radio de aceptación:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{si } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{si no} \end{cases}, \quad (2.17)$$

es decir, si el nuevo estado tiene menor energía que el anterior, será siempre aceptada la transición. Si el estado nuevo es de mayor energía, la transición se aceptará con un radio de aceptación igual a la probabilidad dada en la ecuación.

Luego se define como paso del algoritmo a la siguiente secuencia:

1. Partiendo de un estado μ con temperatura T , se elige un espín de forma aleatoria.
2. Se calcula la diferencia de energía ΔE entre el estado actual y aquel al que se transicionaría al cambiar el valor del espín elegido.
3. Si $\Delta E \leq 0$ se efectúa la transición.
4. Si $\Delta E > 0$ se genera un número real aleatorio (r) en el intervalo $(0, 1)$ y si se cumple $r \leq e^{-\beta \Delta E}$, se efectúa la transición. En caso contrario se permanece en el estado μ .

Un paso Monte Carlo (PMC) consiste en la realización de N pasos del algoritmo. Se realizan una cantidad de PMC suficiente para alcanzar el equilibrio y luego se corren otra cantidad de PMC para tomar medidas de las cantidades físicas de interés. Por último, se cambia la temperatura y se comienza nuevamente el ciclo.

Capítulo 3

Resultados y Discusión

En este capítulo se muestran los resultados de las simulaciones para el modelo presentado en el capítulo anterior:

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J_{\text{RKKY}} (2k_F a)^3 \sum_{\Delta} \mathcal{F}(\Delta) S_i S_{i+\Delta} - B \sum_i S_i \quad (3.1)$$

Primero, comentaremos el análisis previo realizado para elegir los distintos valores de los parámetros. Luego, indicaremos los detalles técnicos de la simulación (tamaño de la red, pasos de Monte Carlo, etc). Finalmente, se presentarán los resultados en dos secciones, considerando acoplamiento directo ferromagnético ($J = -1$) y antiferromagnético ($J = 1$).

Para estudiar la región donde fuera máxima la competencia entre las interacciones RKKY y la constante de intercambio de primeros vecinos ($|J| = 1$), se enfocó el estudio alrededor de los valores de los parámetros J_{RKKY} y k_F que anulan el valor de la constante efectiva a primeros vecinos:

$$J_1 = J + J_{\text{RKKY}} (2k_F a)^3 \mathcal{F}(1). \quad (3.2)$$

Para que esta cantidad se anule se eligieron los sets de parámetros: $[J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}, J_{\text{RKKY}} = -1]$, $[J = -1, k_F = \pi, J_{\text{RKKY}} = 1]$, $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}, J_{\text{RKKY}} = 1]$ y $[J = 1, k_F = \pi, J_{\text{RKKY}} = -1]$. Una vez fijos los valores de J_1 y k_F , se tomaron también valores de J_{RKKY} cercanos al valor para el cual $J_1 = 0$.

Se realizaron simulaciones en una red cuadrada de lado $L = 12$, con parámetro de red $a = 1$, considerando el modelo de la ecuación (3.1) hasta terceros vecinos en la interacción RRKY, y, como se verá más adelante, hasta quintos vecinos en algunos casos. Se utilizó el algoritmo de Monte Carlo Metrópolis, realizando 8000 PMC de relajación y tomando medidas en 4000 PMC. Se utilizó $k_B = 1$ para simplificar. En todos los gráficos que se presentan en este trabajo, la temperatura T se presenta en unidades de $|J| = 1$. Para cada set de parámetros, se realizaron hasta doce copias. Entre estas copias, se promedió la energía, la magnetización, el calor específico, y los módulos de los parámetros de orden según correspondía. Se consideró a la desviación estándar como el error de dichos promedios.

En todos los casos se realizaron diagramas de fases para resumir los resultados. Éstos fueron construidos en función de la temperatura o del campo magnético externo, como se detalla en cada caso. También se diseñaron los parámetros de orden pertinentes para detectar las fases de baja temperatura de campo magnético $B = 0$, que se describen en las siguientes secciones.

En particular para los sistemas con $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}]$ se estudió el orden magnético a baja temperatura en función del campo externo. Considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, para $B = 0$, con $J_{\text{RKKY}} = 0.8$ y $J_{\text{RKKY}} = 1.3$, se encontró que el sistema

parecía no estar ordenado a baja temperatura. Por lo tanto, teniendo en cuenta que las interacciones RKKY son de largo alcance, se agregaron acoplamientos RKKY hasta quintos vecinos, incluyéndolas para todo el rango de valores de J_{RKKY} considerado. De esta forma, se analizó si se estabilizaba algún orden con estas interacciones adicionales, de manera que la falta de orden a baja temperatura fuera simplemente debido al modelo efectivo considerado previamente. En presencia de un campo magnético externo, se observaron diferentes plateaux de magnetización en ambos casos, considerando interacciones RKKY hasta terceros y hasta quintos vecinos, como se comenta en las próximas secciones.

3.1. Acoplamiento directo ferromagnético ($J = -1$)

En esta sección se exhiben y discuten los resultados de las simulaciones de Monte Carlo para el caso de acoplamiento directo ferromagnético ($J = -1$). Todas las simulaciones fueron hechas a campo $B = 0$ y considerando interacciones hasta terceros vecinos.

Se obtuvieron fases conocidas en otros modelos de la red cuadrada, como fases ordenadas tipo Néel, ferromagnéticas y tipo stripes 1-1. Se armaron y graficaron los parámetros de orden pertinentes.

3.1.1. Caso $k_F = \pi$

Como se dijo anteriormente, en caso de acoplamiento directo ferromagnético, la constante de intercambio efectiva J_1 se anula para $J_{\text{RKKY}} = 1$ y $k_F = \pi$. Se tomaron valores de J_{RKKY} alrededor de estos puntos. Los valores efectivos de las constantes de acoplamiento obtenidas para $[J = -1, k_F = \pi]$ se observan en la tabla 3.1, donde J_i es la constante de acoplamiento efectiva a i -ésimos vecinos, obtenida de la suma del acoplamiento directo (a primeros vecinos) y el acoplamiento RKKY a distancia Δ .

	Δ	$J_{\text{RKKY}} = 0.7$	$J_{\text{RKKY}} = 0.8$	$J_{\text{RKKY}} = 0.9$
J_1	1	-0.3	-0.2	-0.1
J_2	$\sqrt{2}$	-0.227	-0.259	-0.291
J_3	2	0.087	0.1	0.112
	Δ	$J_{\text{RKKY}} = 1$	$J_{\text{RKKY}} = 1.1$	$J_{\text{RKKY}} = 1.2$
J_1	1	0	0.1	0.2
J_2	$\sqrt{2}$	-0.324	-0.356	-0.389
J_3	2	0.125	0.137	0.15

Tabla 3.1. Constantes efectivas hasta terceros vecinos para $J = -1$, $k_F = \pi$.

Los resultados para el set $[J = -1, k_F = \pi]$ se resumen en el diagrama de fases T vs J_{RKKY} de la Fig. 3.1. Se observa un mínimo en la temperatura crítica para $J_{\text{RKKY}} = 1$. Para $J_{\text{RKKY}} \geq 1$ la fase ordenada es de tipo Néel y para $J_{\text{RKKY}} < 1$ es ferromagnética.

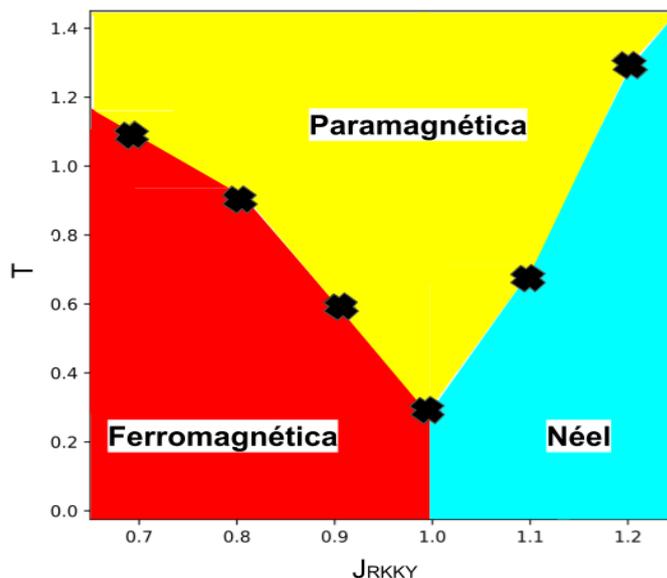


Figura 3.1. Diagrama de fases T vs J_{RKKY} para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \pi$], considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, a campo $B = 0$.

3.1.1.1. $J_{\text{RKKY}} < 1$

En este apartado se encuentran los resultados para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \pi$] y J_{RKKY} entre 0.7 y 0.9, considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, a campo $B = 0$. A baja temperatura el estado es ferromagnético (Fig. 3.2). Esto podría esperarse observando la tabla 3.1, dado que, en los rangos estudiados, las constantes efectivas a primeros y segundos vecinos son ferromagnéticas (negativas), favoreciendo un orden ferromagnético. Este orden es caracterizado por la magnetización por espín (ecuación 2.2). Teniendo en cuenta que la magnetización a baja temperatura puede valer ± 1 , al realizar el promedio entre copias se utilizó el módulo de la magnetización por espín. Se presenta este último junto al calor específico en función de la temperatura en la Fig. 3.3.

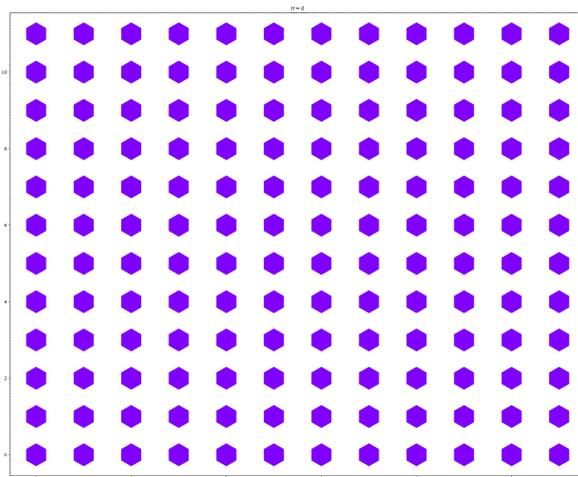


Figura 3.2. Configuración de espines ferromagnética a $T = 0.03$ para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \pi, J_{\text{RKKY}} = 0.7$] considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos a campo $B = 0$.

3. Resultados y Discusión

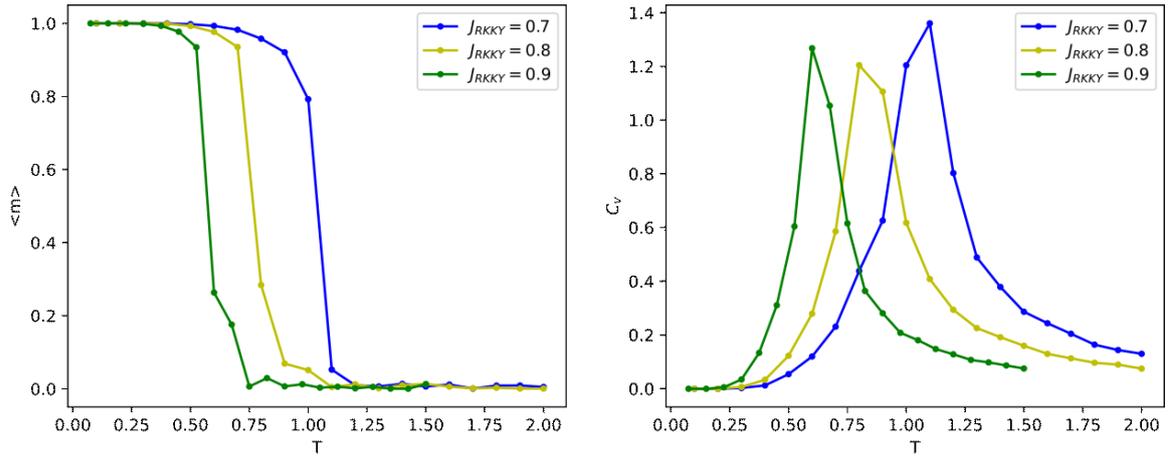


Figura 3.3. Módulo de la magnetización y calor específico, en función de la temperatura, para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \pi$] y $J_{\text{RKKY}} = 0.7$ (en azul), $J_{\text{RKKY}} = 0.8$ (en amarillo) y $J_{\text{RKKY}} = 0.9$ (en verde), considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos a campo $B = 0$.

3.1.1.2. $J_{\text{RKKY}} \geq 1$

Para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \pi$] y J_{RKKY} entre 1 y 1.2 considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos a campo $B = 0$, el estado fundamental es de tipo Néel (Fig. 3.4). El parámetro de orden correspondiente a esta fase es Φ'_1 (2.3). Como el parámetro de orden puede valer ± 1 , al realizar el promedio entre copias, y para graficar, se utilizó el módulo del parámetro, al que se denominó Φ_1 . Se graficó este último, junto al calor específico, en función de la temperatura, en la Fig. 3.5. Por otra parte, se observa que aquí también el orden es consistente con los acoplamientos efectivos presentados en la tabla 3.1, ya que las constantes para primeros y terceros vecinos resultan antiferromagnéticas, y ferromagnéticas y de mayor magnitud para segundos vecinos, favoreciendo el orden de Néel.

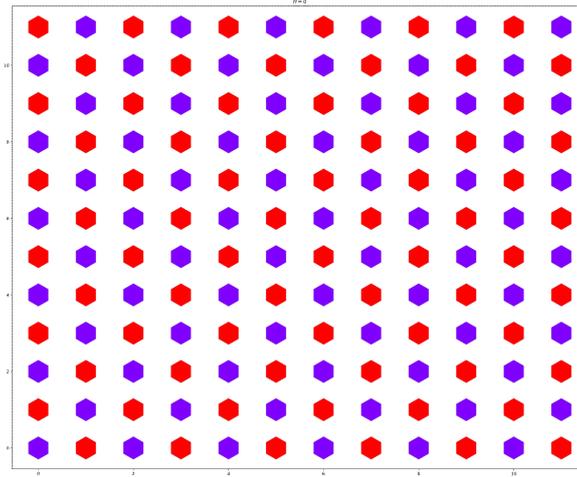


Figura 3.4. Configuración de espines, obtenida por el método Monte Carlo - Metrópolis, a $T = 0.03$ para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \pi, J_{\text{RKKY}} = 1$] considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos a campo $B = 0$.

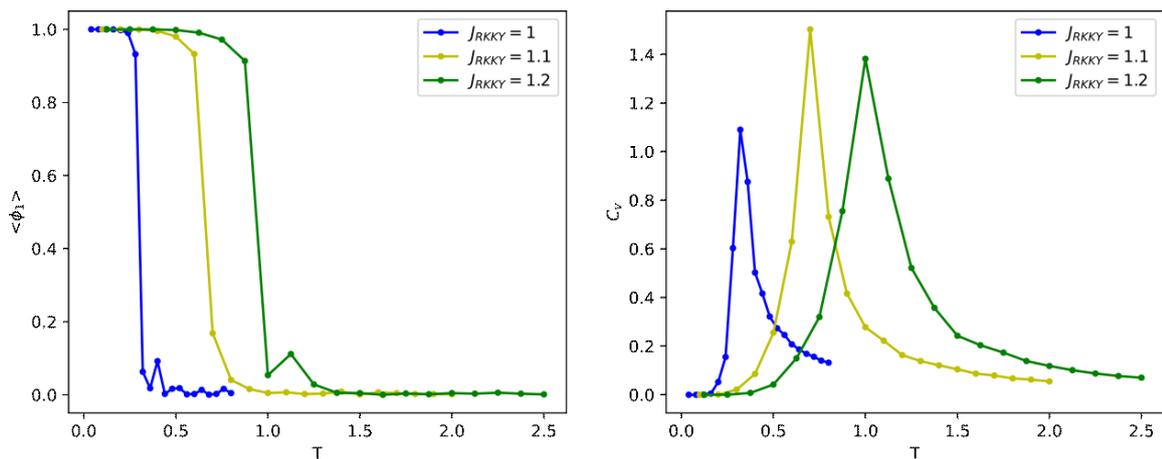


Figura 3.5. Parámetro de orden Φ_1 y calor específico, en función de la temperatura, para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \pi$] con $J_{\text{RKKY}} = 1$ (en azul), $J_{\text{RKKY}} = 1.1$ (en amarillo) y $J_{\text{RKKY}} = 1.2$ (en verde), considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos a campo $B = 0$.

3.1.2. Caso $k_F = \frac{\pi}{2}$

Procediendo como en el caso anterior, los valores efectivos de las constantes de acoplamiento obtenidas para [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}$] se observan en la tabla 3.2, donde J_i es la constante de acoplamiento efectiva a i -ésimos vecinos, obtenida de la suma del acoplamiento directo (a primeros vecinos) y el acoplamiento RKKY a distancia Δ .

	Δ	$J_{\text{RKKY}} = -1.4$	$J_{\text{RKKY}} = -1.3$	$J_{\text{RKKY}} = -1.2$	$J_{\text{RKKY}} = -1.1$
J_1	1	0.4	0.3	0.2	0.1
J_2	$\sqrt{2}$	0.025	0.023	0.021	0.019
J_3	2	-0.175	-0.163	-0.15	-0.137
	Δ	$J_{\text{RKKY}} = -1$	$J_{\text{RKKY}} = -0.9$	$J_{\text{RKKY}} = -0.8$	$J_{\text{RKKY}} = -0.7$
J_1	1	0	-0.1	-0.2	0.3
J_2	$\sqrt{2}$	0.017	0.016	0.014	0.012
J_3	2	-0.12	-0.112	-0.1	-0.087

Tabla 3.2. Constantes efectivas para interacciones RKKY hasta terceros vecinos para $J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}$

Los resultados para el set [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}$] se vuelcan en el diagrama de fases T vs J_{RKKY} de la Fig. 3.6. Se observa un mínimo en la temperatura crítica para $J_{\text{RKKY}} = -1$, en donde la fase ordenada es colineal. Para $J_{\text{RKKY}} < -1$ la fase ordenada es de tipo Néel y para $J_{\text{RKKY}} > -1$ es ferromagnética.

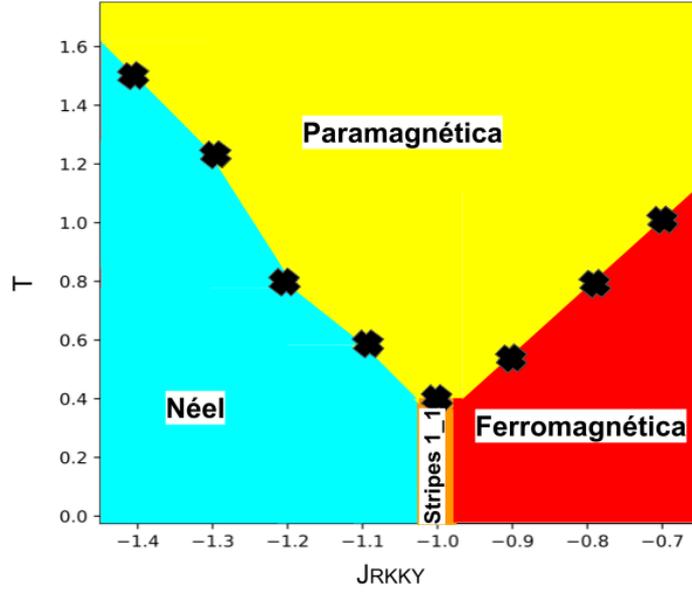


Figura 3.6. Diagrama de fases T_c vs J_{RKKY} para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}$] considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos a campo $B = 0$.

3.1.2.1. $J_{\text{RKKY}} < -1$

En este apartado se encuentran los resultados para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}$] y J_{RKKY} entre -1.4 y -1.1 , considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, a campo $B = 0$. El estado fundamental del sistema es de tipo Néel, es decir que la transición se caracteriza por el parámetro de orden Φ_1 (2.3). Se graficó el módulo de este parámetro junto al calor específico para distintos valores de la constante RKKY en la Fig. 3.7. Se observa que, al aumentar el valor de J_{RKKY} , disminuye la temperatura de transición.

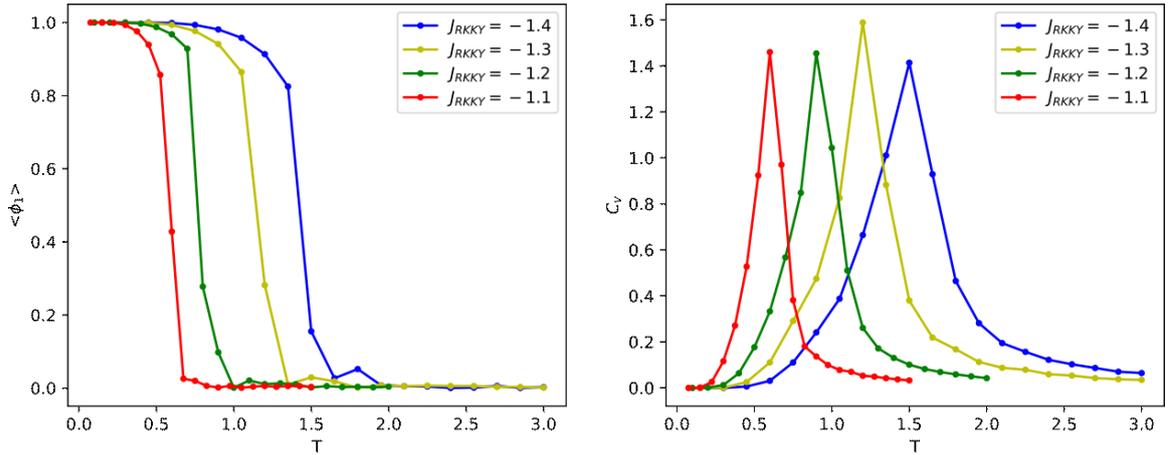


Figura 3.7. Parámetro de orden Φ_1 y calor específico, en función de la temperatura, para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}$] con $J_{\text{RKKY}} = -1.4$ (en azul), $J_{\text{RKKY}} = -1.3$ (en amarillo), $J_{\text{RKKY}} = -1.2$ (en verde) y $J_{\text{RKKY}} = -1.1$ (en rojo), considerando hasta terceros vecinos en el acoplamiento RKKY a campo $B = 0$.

3.1.2.2. $J_{\text{RKKY}} = -1$

Para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}, J_{\text{RKKY}} = -1$], considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, a campo $B = 0$, la configuración de espines a baja temperatura es del tipo stripes 1_1, formado por líneas horizontales o verticales, ilustradas en la Fig. 3.9. Para caracterizar esta fase se definieron parámetros de orden de la forma:

$$\Phi'_2 = \sum_{i,j} (-1)^j S_{ij}, \quad (3.3)$$

donde S_{ij} es el valor del espín en el sitio de la posición (i, j) . Este parámetro de orden tiene dos variantes: la que se presenta en 3.3, y cambiando el exponente j por i . Esto se debe a que el estado tiene dos degeneraciones: configuración de líneas verticales u horizontales, presentadas en la Fig. 3.8. Se puede pasar de una a la otra mediante una rotación del sistema en un ángulo de $\pi/2$. La configuración en la fase ordenada tiene magnetización nula y celda magnética unitaria cuadrada de lado $l = 2$. Dado que existen dos variantes del parámetro de orden, y en cada una este puede valer ± 1 a baja temperatura, se utilizó como parámetro de orden total a la suma de los módulos de dichas variantes. Se realizaron los gráficos de este parámetro de orden, al que se denominó Φ_2 , junto al calor específico, en función de la temperatura, en la Fig. 3.10.

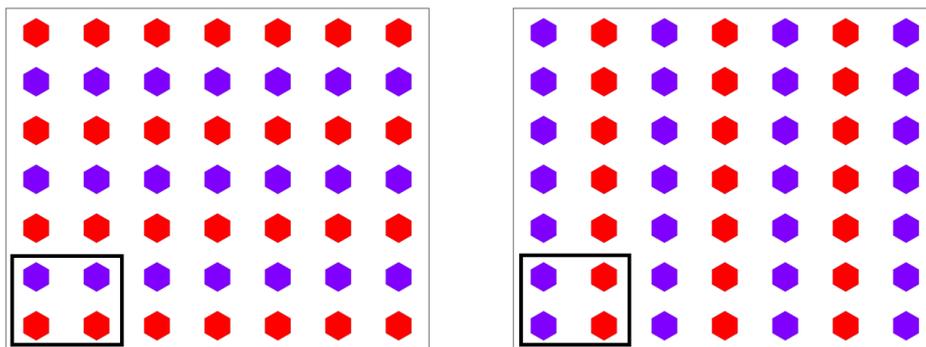


Figura 3.8. Configuraciones de espines para el orden stripes 1_1, que corresponden a las dos variantes del parámetro de orden Φ_2 . Se marca en un cuadrado negro la celda unitaria.

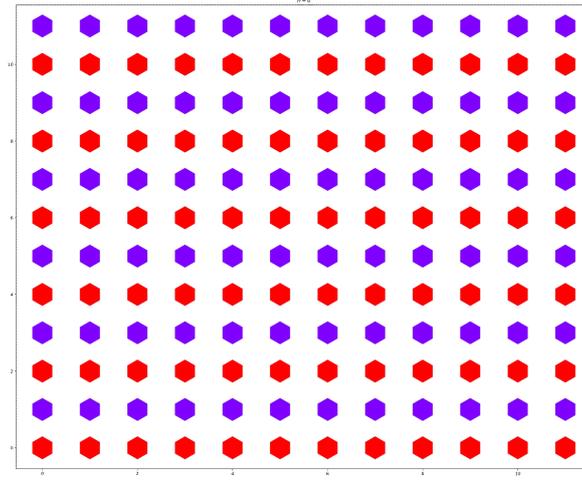


Figura 3.9. Configuración de espines de uno de los posibles órdenes stripes 1.1 a $T = 0.03$ para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}, J_{\text{RKKY}} = -1$], considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, a campo $B = 0$.

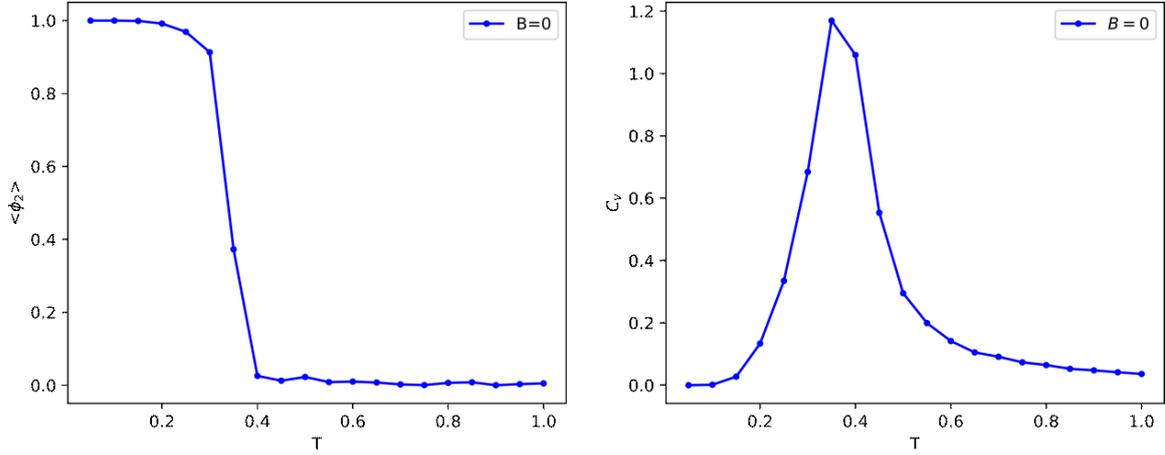


Figura 3.10. Parámetro de orden Φ_2 y calor específico, en función de la temperatura, para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}, J_{\text{RKKY}} = -1$], considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, a campo $B = 0$.

3.1.2.3. $J_{\text{RKKY}} > -1$

Para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}$] y J_{RKKY} entre -0.9 y -0.7 , considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos a campo $B = 0$, a baja temperatura la configuración de espines es ferromagnética. Por lo tanto, la transición se caracteriza por la magnetización (2.2). Se exhibe el módulo de la magnetización por espín junto al calor específico, para distintos valores de J_{RKKY} , en función de la temperatura, en la Fig. 3.11. Se observa que la temperatura crítica crece al aumentar el valor de J_{RKKY} .

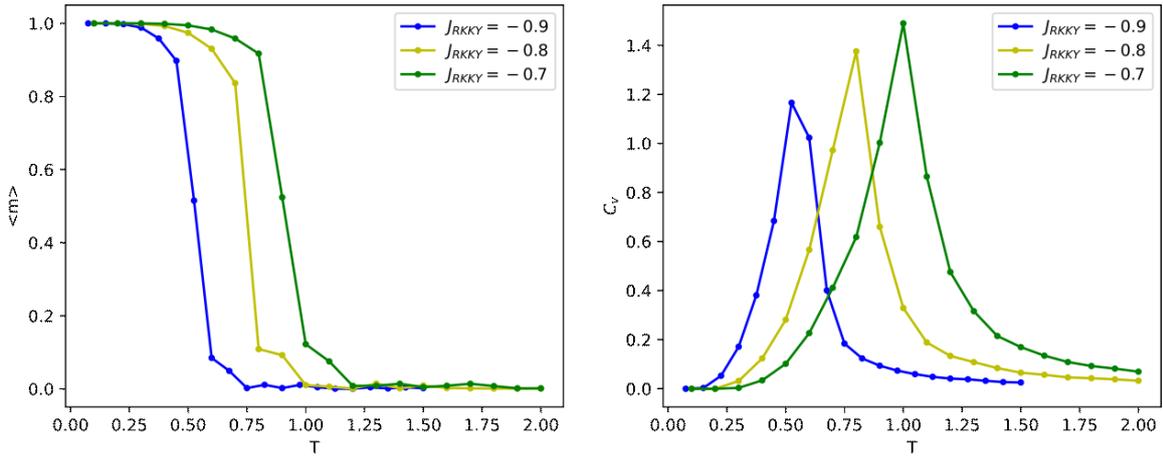


Figura 3.11. Módulo de la magnetización y calor específico, en función de la temperatura, para el set de parámetros [$J = -1, k_F = \frac{\pi}{2}$] con $J_{\text{RKKY}} = -0.9$ (en azul), $J_{\text{RKKY}} = -0.8$ (en amarillo) y $J_{\text{RKKY}} = -0.7$ (en verde), considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, a campo $B = 0$.

3.2. Acoplamiento directo antiferromagnético ($J = 1$)

En esta sección se encuentran y discuten los resultados para el caso de acoplamiento directo antiferromagnético ($J = 1$). Se estudió el modelo para los valores de $k_F = \pi$ y $\pi/2$. En el primer caso, se realizaron simulaciones Monte Carlo, considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, a campo $B = 0$, y en el segundo se estudió el comportamiento del sistema al agregar campo magnético, considerando interacciones RKKY hasta terceros y hasta quintos vecinos.

Para $k_F = \pi$ se obtuvo, para todos los valores de J_{RKKY} , la fase ordenada stripes 1-1. Para $k_F = \frac{\pi}{2}$ se observaron diversas fases y plateaux de magnetización para $m = 0, \frac{1}{3}$, considerando hasta terceros vecinos en la interacción RKKY, y $m = 0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$ y $\frac{5}{9}$, incluyendo hasta quintos vecinos. También se observó que algunos sistemas que no se ordenan considerando hasta terceros vecinos, si lo hacen cuando se incluyen hasta quintos vecinos.

3.2.1. Caso $k_F = \pi$

Para el set de parámetros [$J = 1, k_F = \pi$] a campo $B = 0$ y J_{RKKY} entre -1.2 y -0.8 , los valores efectivos de las constantes de acoplamiento obtenidas para [$J = 1, k_F = \pi$] se observan en la tabla 3.3, donde J_i es la constante de acoplamiento efectiva a i -ésimos vecinos, obtenida de la suma del acoplamiento directo (a primeros vecinos) y el acoplamiento RKKY a distancia Δ . Como comentario, se observa que para los valores de J_{RKKY} estudiados, el acoplamiento más fuerte es el de segundos vecinos, que resulta antiferromagnético.

	Δ	$J_{\text{RKKY}} = -1.2$	$J_{\text{RKKY}} = -1.1$	$J_{\text{RKKY}} = -1$	$J_{\text{RKKY}} = -0.9$	$J_{\text{RKKY}} = -0.8$
J_1	1	-0.2	-0.1	0	0.1	0.2
J_2	$\sqrt{2}$	0.389	0.356	0.324	0.291	0.259
J_3	2	-0.15	-0.137	-0.125	-0.112	-0.1

Tabla 3.3. Constantes efectivas hasta terceros vecinos para $J = 1, k_F = \pi$

Se obtuvo que a baja temperatura el sistema se ordena siempre en el estado stripes 1-1, es decir, que los parámetros de orden correspondientes son de la forma Φ'_2 (ecuación 3.3). Se

3. Resultados y Discusión

realizaron los gráficos de la suma de los módulos de las distintas variantes (Φ_2) junto al calor específico, en función de la temperatura, como se muestra en la Fig. 3.12. Se observa que la temperatura crítica disminuye al aumentar J_{RKKY} .

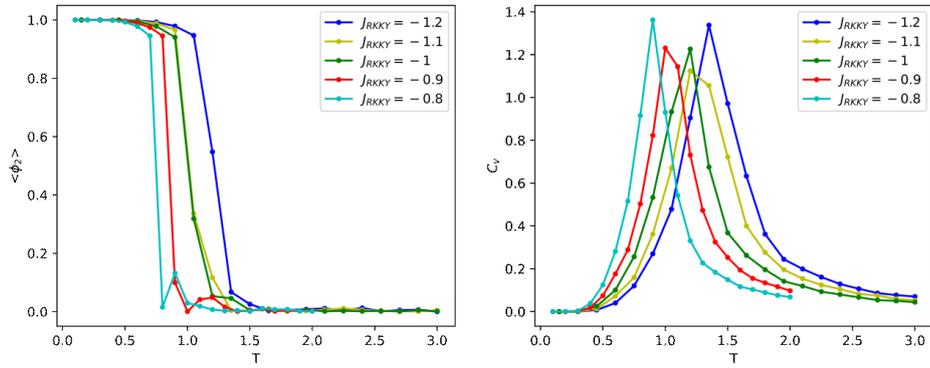


Figura 3.12. Parámetro de orden Φ_2 y calor específico, en función de la temperatura, para $[J = 1, k_F = \pi]$ con $J_{\text{RKKY}} = -1.2$ (en azul), $J_{\text{RKKY}} = -1.1$ (en amarillo), $J_{\text{RKKY}} = -1$ (en verde), $J_{\text{RKKY}} = -0.9$ (en rojo) y $J_{\text{RKKY}} = -0.8$ (en celeste), considerando hasta terceros vecinos a campo $B = 0$.

3.2.2. Caso $k_F = \frac{\pi}{2}$

Para el set de parámetros [$J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}$] se simularon sistemas variando J_{RKKY} y el campo externo, considerando hasta terceros y hasta quintos vecinos en el acoplamiento RKKY. En un primer apartado, se presentan los resultados considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos. Se observaron diversas fases y plateaux de magnetización para $m = 0$ y $\frac{1}{3}$ y se observa que para algunos valores de los parámetros en particular el sistema no se ordena a baja temperatura, lo cual motiva considerar más vecinos en el acoplamiento RKKY. Esto es posible dado que la interacción es de largo alcance. Es por esto que, en un segundo apartado, se presentan los resultados considerando interacciones hasta quintos vecinos. Se observan diversas fases y plateaux de magnetización con $m = 0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$ y $\frac{5}{9}$. En ambos casos se resumieron los resultados de las simulaciones en un diagrama de fases de baja temperatura J_{RKKY} vs B .

Los valores efectivos de las constantes de acoplamiento obtenidas, para el set [$J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}$], se observan en la tabla 3.4.

	Δ	$J_{\text{RKKY}} = 0.7$	$J_{\text{RKKY}} = 0.8$	$J_{\text{RKKY}} = 0.9$	$J_{\text{RKKY}} = 1$
J_1	1	0.3	0.2	0.1	0
J_2	$\sqrt{2}$	-0.012	-0.014	-0.016	-0.017
J_3	2	0.087	0.1	0.112	0.125
J_4	$\sqrt{5}$		0.046	0.052	0.057
J_5	$\sqrt{8}$		-0.032	-0.036	-0.04
	Δ	$J_{\text{RKKY}} = 1.1$	$J_{\text{RKKY}} = 1.2$	$J_{\text{RKKY}} = 1.3$	$J_{\text{RKKY}} = 1.4$
J_1	1	-0.1	-0.2	-0.3	-0.4
J_2	$\sqrt{2}$	-0.019	-0.02	-0.023	-0.024
J_3	2	0.137	0.15	0.162	0.175
J_4	$\sqrt{5}$	0.063	0.069	0.075	
J_5	$\sqrt{8}$	-0.045	-0.049	-0.053	

Tabla 3.4. Constantes efectivas hasta terceros vecinos para $J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}$.

3.2.2.1. Acoplamiento RKKY hasta terceros vecinos

En este apartado se encuentran los resultados para el set de parámetros $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}]$, considerando acoplamientos RKKY hasta terceros vecinos. Se presenta un diagrama de fase J_{RKKY} vs B a baja temperatura en la Fig. 3.13.

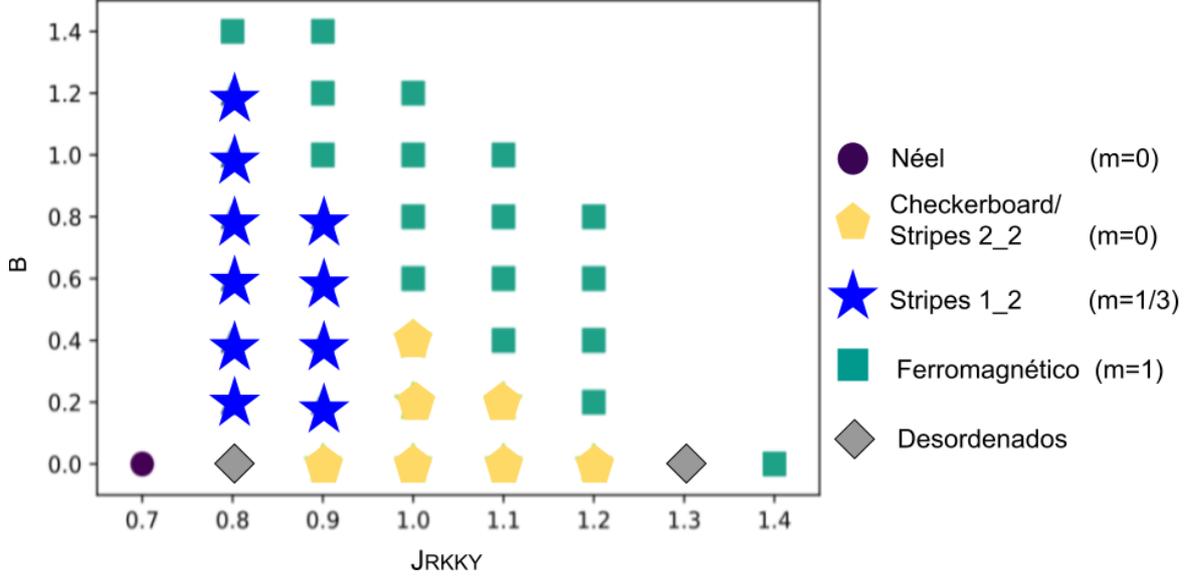


Figura 3.13. Diagrama de fases J_{RKKY} vs B para el set de parámetros $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}]$ a $T = 0.03$ teniendo en cuenta acoplamientos RKKY hasta terceros vecinos. A la derecha, se muestran las identificaciones de las fases y el valor de la magnetización por espín para cada una de ellas.

Como se observa en el diagrama, pueden indentificarse cuatro fases ordenadas distintas a baja temperatura: dos fases diferentes de magnetización nula (una de Néel, y otra degenerada con dos tipos de configuraciones), una fase con $m = \frac{1}{3}$ y la fase ferromagnética, no sólo en el plateau de saturación $m = 1$, si no también a $B = 0$ para $J_{\text{RKKY}} = 1.4$. Se destacan dos regiones desordenadas (por lo menos hasta la temperatura alcanzada por la simulación) para $B = 0$.

- Tomando el caso representativo de $J_{\text{RKKY}} = 0.9$, se presenta en la Fig 3.14 un gráfico de magnetización en función del campo externo, donde se aprecia un plateau de magnetización $m = \frac{1}{3}$, comparando diferentes temperaturas. También se indican ejemplos de configuraciones de espines correspondientes a puntos con diferente magnetización, y se ilustran dos ejemplos de las posibles fases de $m = 0$, que se describirán y caracterizarán más adelante.
- Para $J_{\text{RKKY}} = 0.7$, a campo $B = 0$, el orden es de tipo Néel.
- Para $J_{\text{RKKY}} = 0.8$, con campo B entre 0.2 y 1.2 y $J_{\text{RKKY}} = 0.9$, con campo B entre 0.2 y 0.8, se obtuvo como estado fundamental una configuración de espines de $m = \frac{1}{2}$ donde se forman líneas diagonales uniendo segundos vecinos, siendo una diagonal de espines down y luego dos up, a la que se denominó “stripes 1_2”.
- Para una amplia región del espacio de parámetros, el estado fundamental se encuentra degenerado entre dos órdenes conocidos como “checkerboard” y “stripes” [32], cuya

celdas unitarias son de lado $l = 4$. Se puede demostrar que esta degeneración en la red cuadrada existe independientemente del tipo de interacción y la cantidad de vecinos que se consideren. Debido a que se encontraron otras fases con líneas de espines diagonales, al orden “stripes” se lo denominó también en este trabajo “stripes 2_2”, que hace referencia a que se forman dos líneas diagonales de espines down cada dos líneas diagonales de espines up.

Centrándose en la región de $m = 0$ donde se encuentran dos tipos de fases de baja temperatura degeneradas, la checkerboard y la stripes 2.2. A continuación se definen los parámetros de orden para cada una. Se definió el parámetro de orden:

$$\Phi'_3 = \sum_{i,j} (-1)^{[\frac{i}{2}] + [\frac{j}{2}]} S_{ij}, \quad (3.4)$$

para caracterizar la transición del caso de estado fundamental con configuración checkerboard. Este parámetro tiene cuatro variantes, una por cada posición en un cuadrado del tablero en las cuales podría encontrarse el espín de la posición $(i, j) = (1, 1)$ (Fig. 3.15). Pueden contemplarse estas variantes del parámetro de orden reemplazando $i \rightarrow i + 1$, $j \rightarrow j + 1$, es decir, las distintas configuraciones pueden transformarse unas en otras mediante traslaciones de un sitio en el eje x , en el eje y , y en ambos a la vez.

Para caracterizar la fase de baja temperatura de configuración stripes 2_2 se definió el parámetro de orden:

$$\Phi''_3 = \sum_{i,j} (-1)^{[\frac{(4-j \bmod 4 + i \bmod 4) \bmod 4}{2}]} S_{ij}, \quad (3.5)$$

donde S_{ij} es el espín en la posición (i, j) , $[]$ significa parte entera y $i \bmod 4$ es el resto de la división $i/4$. Este parámetro de orden tiene cuatro variantes que se pueden considerar haciendo los reemplazos: $-j \bmod 4 + i \bmod 4 \rightarrow j \bmod 4 - i \bmod 4$, $j \bmod 4 \rightarrow 3 - j \bmod 4$. Se presentan ejemplos de las distintas variantes en la Fig. 3.16. Las distintas configuraciones pueden transformarse unas en otras mediante traslaciones de un sitio en el eje x o el eje y combinadas con rotaciones del sistema en un ángulo de $\pi/2$.

Para ver que la degeneración es característica de la red cuadrada se puede elegir un espín, digamos del orden stripes 2_2, e invertir la fila justo por encima y justo por debajo del espín respecto de un eje vertical que pase por el espín elegido, luego se hace lo mismo con la fila que se halla a tres espines de distancia hacia arriba y la que se encuentra a tres espines de distancia hacia abajo y así sucesivamente. El resultado final es el orden checkerboard, y dado que la energía del sistema es invariante ante la inversión propuesta, se ve que los órdenes son energéticamente equivalentes independientemente de las interacciones y la cantidad de vecinos considerada.

Como se comentó anteriormente, los órdenes checkerboard y stripes 2_2 son dos configuraciones energéticamente equivalentes y cada una tiene cuatro variantes. Se asoció un parámetro de orden a cada variante y se graficó el parámetro ϕ_3 , que se definió como la suma de los módulos de las 4 variantes de los dos parámetros (3.4) y (3.5).

Para valores de campo mayores a los presentados en los párrafos anteriores en cada set de parámetros [$J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}$], con J_{RKKY} entre 0.8 y 1.2, el estado ordenado es ferromagnético.

En la figura (Fig. 3.17) se muestran dos ejemplos a campo $B = 0$ y $T = 0.03$ donde se ve que el sistema no se ordena, para $J_{\text{RKKY}} = 0.8$ y 1.3. En el primer caso puede deberse a que, para este set de parámetros, se obtiene la relación entre constantes efectivas $J_3/J_1 = 0.5$ y $J_2/J_1 = -0.07$, que se encuentran próximas al punto degenerado ($J_3/J_1 = \frac{1}{2}$, $J_2/J_1 = 0$) [29]. Algo similar podría suceder en el segundo caso, donde $|J_3/J_1| = 0.54$ y $J_2/J_1 = 0.08$. Dado que en estos sistemas no se encontraron fases ordenadas, se estudió el comportamiento

3. Resultados y Discusión

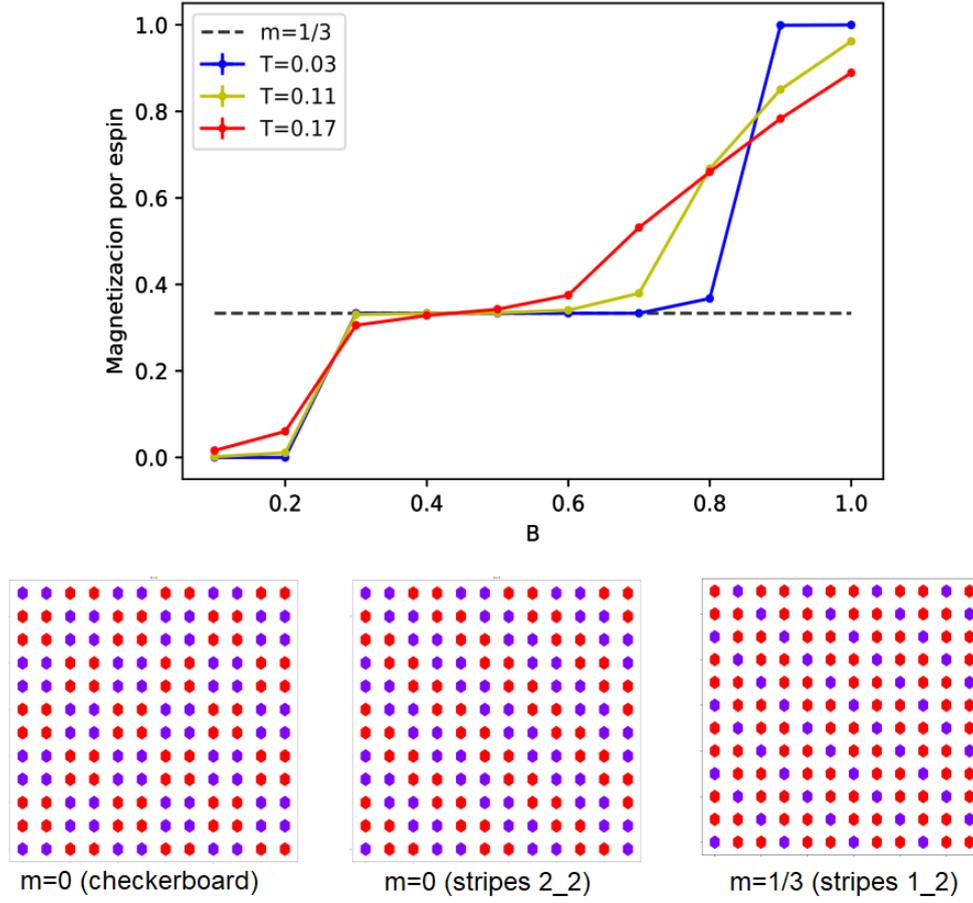


Figura 3.14. Arriba la magnetización en función del campo externo para el set de parámetros [$J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}, J_{\text{RKKY}} = 0.9$] a temperaturas $T = 0.03$ (en azul), $T = 0.11$ (en amarillo), $T = 0.17$ (en rojo), considerando hasta terceros vecinos en la interacción RKKY. La línea punteada es de ayuda para la vista, evidenciando el plateau en $m = \frac{1}{3}$. Abajo, de izquierda a derecha, las configuraciones de espín para el mismo set de parámetros a campo $B = 0.2$ (ordenes checkerboard y stripes 2_2) y $B = 0.4$ (orden stripes 1_2).

considerando acoplamientos RKKY hasta quintos vecinos, como se detalla en el siguiente apartado.

En la figura (Fig. 3.18) se presenta el módulo de la magnetización y los parámetros de orden Φ_1 y Φ_3 , en función de la temperatura, para distintos valores de J_{RKKY} y B . En el gráfico de magnetización se observa que, para $J_{\text{RKKY}} = 0.9$, a campo $B = 0.1$ el sistema a baja temperatura tiende a magnetización $m = 0$, a campo $B = 0.4$ tiende a $m = \frac{1}{3}$ y a campo $B = 1$ tiende a $m = 1$.

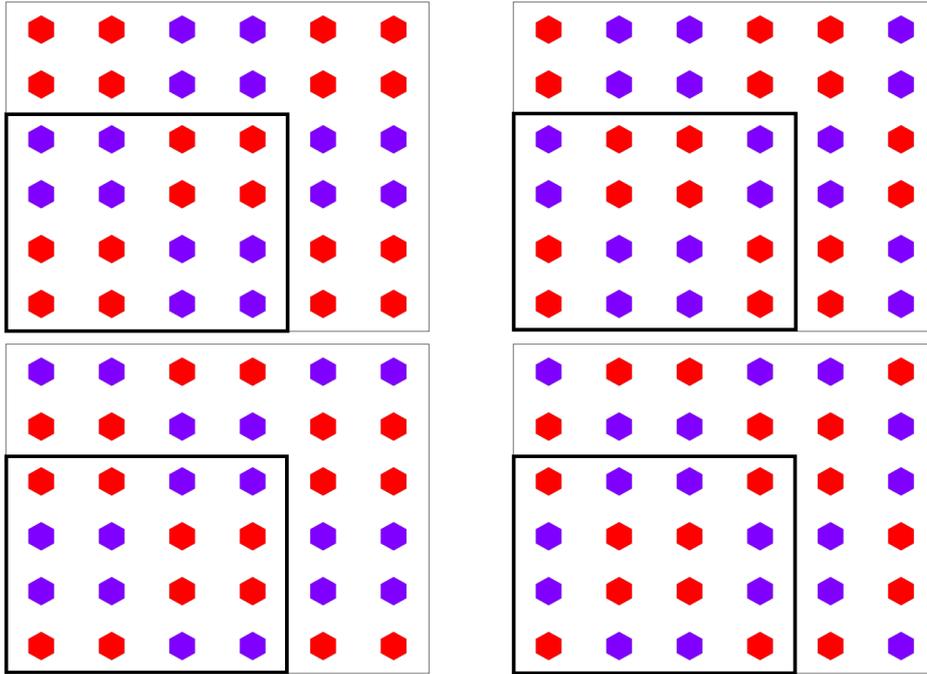


Figura 3.15. Cuatro configuraciones de espines energéticamente equivalentes que corresponden con las cuatro variantes del parámetro de orden ϕ'_3 . En cuadrados negros se encierran las celdas unitarias.

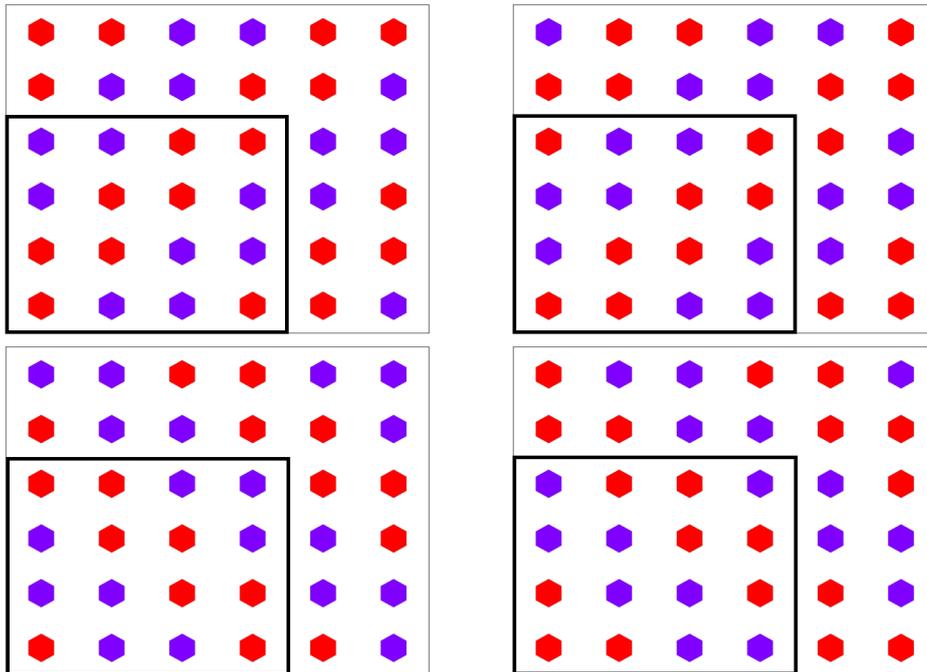


Figura 3.16. Cuatro configuraciones de espines energéticamente equivalentes que corresponden con las cuatro variantes del parámetro de orden ϕ''_3 . Los cuadros negros marcan las celdas unitarias.

3. Resultados y Discusión

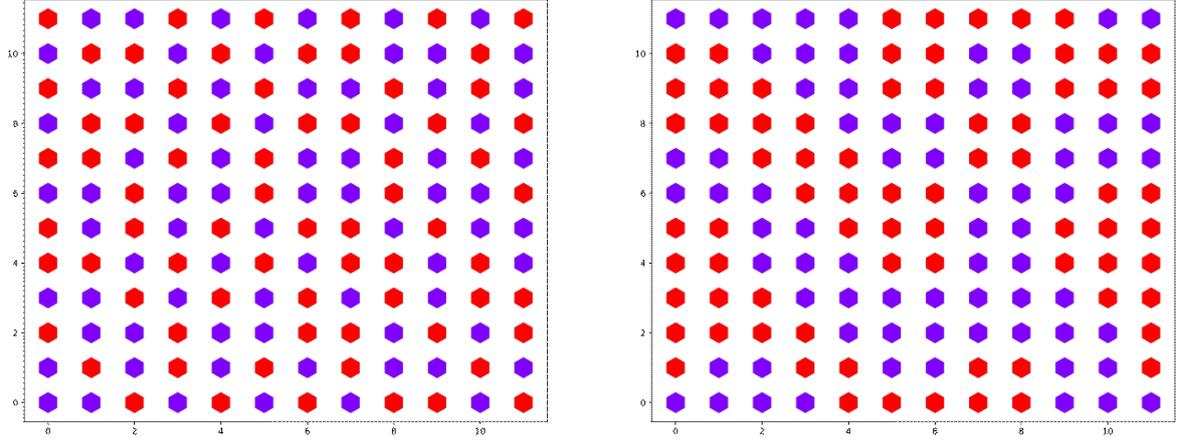


Figura 3.17. Configuraciones de espines desordenadas para el set de parámetros $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}]$ a $T = 0.03$ y campo $B = 0$ teniendo en cuenta interacciones RKKY hasta terceros vecinos. A la izquierda para $J_{\text{RKKY}} = 0.8$ y a la derecha para $J_{\text{RKKY}} = 1.3$.

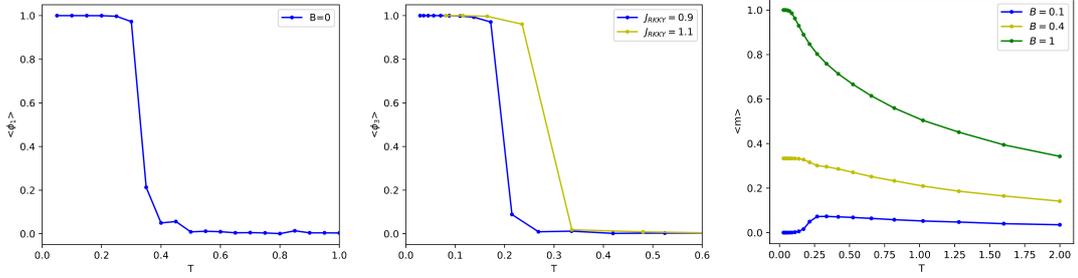


Figura 3.18. Parámetros de orden para el set $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}]$ teniendo en cuenta interacciones RKKY hasta terceros vecinos. A la izquierda, se presenta el parámetro de orden ϕ_1 para $J_{\text{RKKY}} = 0.7$ a campo $B = 0$. En el centro, el parámetro de orden ϕ_3 para $J_{\text{RKKY}} = 0.9$ (en azul) y $J_{\text{RKKY}} = 1.1$ (en amarillo) a campo $B = 0$. A la derecha, la magnetización para $J_{\text{RKKY}} = 0.9$ a campo $B = 0.1$ (en azul), $B = 0.4$ (en amarillo) y $B = 1$ (en verde).

3.2.2.2. Acoplamiento RKKY hasta quintos vecinos

Dado que, considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos, bajando la temperatura hasta $T = 0.03$, no se logró encontrar fases ordenadas para algunos de los valores elegidos de J_{RKKY} y B , se decidió estudiar el comportamiento del sistema al agregar interacciones hasta quintos vecinos.

En este apartado se exhiben los resultados para el set de parámetros $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}]$, considerando hasta quintos vecinos en el acoplamiento RKKY. Se resumieron los resultados en el diagrama de fases (Fig. 3.19).

Al agregar más vecinos en la interacción RKKY, se puede observar que el diagrama de fases de baja temperatura presenta una mayor variedad de fases. En comparación con el caso anterior, en el que se consideró hasta terceros vecinos, para $J_{\text{RKKY}} = 0.8$ y $J_{\text{RKKY}} = 1.3$, a campo $B = 0$, el sistema se ordena. En el primer caso en un orden de tipo Néel, mientras que en el segundo lo hace en una fase nueva, también de magnetización nula, donde se alternan franjas diagonales, como se describirá más adelante. También se observa que los plateaux de magnetización $m = \frac{1}{3}$ que se encontraron para $J_{\text{RKKY}} = 0.8$ y $J_{\text{RKKY}} = 0.9$, ya no se ven y en su lugar se encuentran plateaux de magnetización $m = \frac{1}{2}$ para $J_{\text{RKKY}} = 0.8, 0.9$ y 1 . Además, emergen dos plateaux que no se encontraban en el diagrama de fases de la Fig. 3.13: uno de

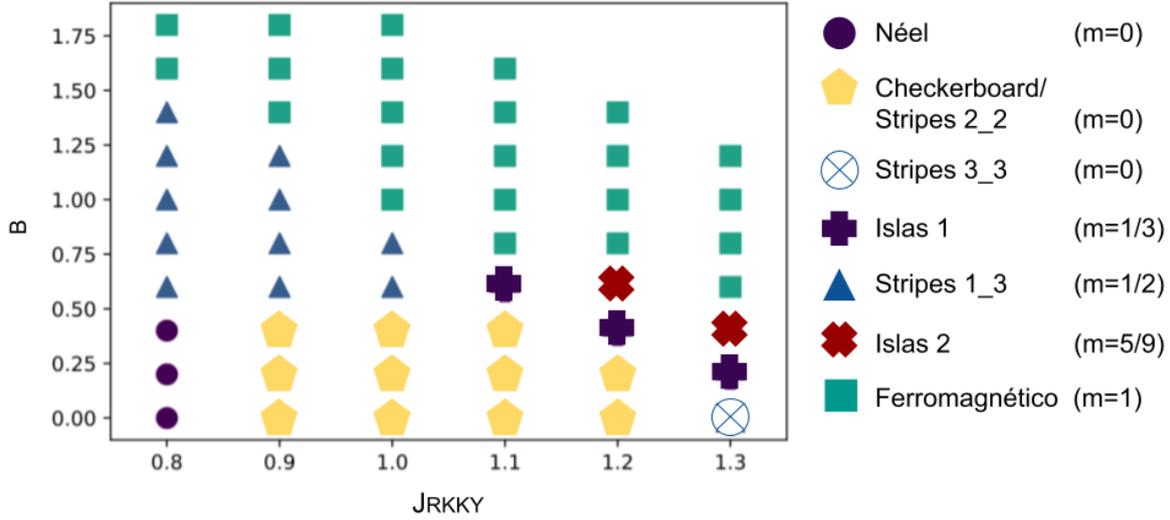


Figura 3.19. Diagrama de fases J_{RKKY} vs B para el set de parámetros [$J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}$] a $T = 0.03$ teniendo en cuenta hasta quintos vecinos. A la derecha se leen las identificaciones de las fases y el valor de la magnetización por espín para cada una de ellas.

$m = \frac{1}{3}$ para $1.1 \leq J_{\text{RKKY}} \leq 1.3$, y otro de $m = \frac{5}{9}$ para $J_{\text{RKKY}} = 1.2$ y 1.3 . El plateau de $m = \frac{1}{3}$ para acoplamiento efectivo $J_1 > 0$ encontrado en este caso tiene una estructura diferente a la encontrada considerando interacciones RKKY hasta terceros vecinos para $J_1 < 0$.

- Para $J_{\text{RKKY}} = 0.8$, aparece un plateau de $m = 0$ con orden de Néel.
- Para $J_{\text{RKKY}} \leq 1$, se observa un plateau de magnetización $m = \frac{1}{2}$, formado por líneas diagonales alternando una línea de espines down y una franja diagonal de tres espines de ancho para espines up. A esta fase se la denominó “stripes 1_3”.
- Para $0.9 \leq J_{\text{RKKY}} \leq 1.2$, a baja temperatura se obtuvo un plateau de $m = 0$, formado por las configuraciones checkerboard y stripes 2_2.
- En una estrecha región de campo magnético, a baja temperatura parece emerger para $1.1 \leq J_{\text{RKKY}} \leq 1.3$ un estado ordenado en forma de islas cuadradas de espines de lado $l = 2$ orientados down en un mar de espines up, con magnetización $m = \frac{1}{3}$, al que se denominó “islas 1”.
- Para $J_{\text{RKKY}} = 1.2, 1.3$, para un pequeño intervalo de B , se obtuvo a baja temperatura un estado ordenado en forma de islas cuadradas de lado $l = 2$ de espines down en un mar de espines up, con magnetización $m = \frac{5}{9}$, al que se denominó “islas 2”. Es decir, para los valores más altos de J_{RKKY} se observa un nuevo plateau exótico de $m = \frac{5}{9}$.
- Para $J_{\text{RKKY}} = 1.3$ se observa con $B = 0$ un estado ordenado a baja temperatura, en forma de líneas diagonales, formada por tres franjas de espines down y tres franjas de espines up, de magnetización nula, al que se denominó “stripes 3_3”.

Se detalla el proceso de magnetización para dos valores de J_{RKKY} . Para $J_{\text{RKKY}} = 0.9$ se graficó, para distintas temperaturas, la magnetización en función del campo magnético,

3. Resultados y Discusión

ver Fig. 3.20. Se aprecia un plateau de magnetización $m = \frac{1}{2}$ bien definido a la más baja temperatura $T = 0.03$, para campos B entre 0.6 y 0.8. Abajo de la curva se muestran tres configuraciones de espines, dos para el plateau de $m = 0$ (la checkerboard y la stripes 2_2) y la obtenida para el plateau de $m = \frac{1}{2}$.

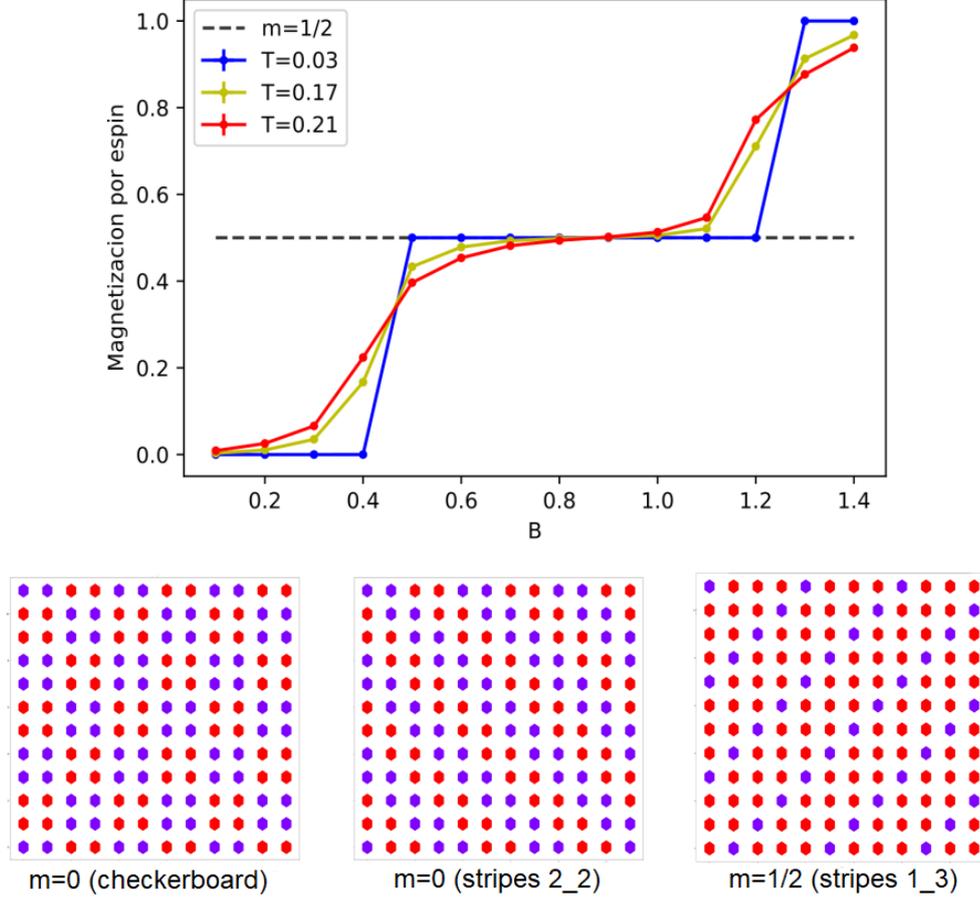


Figura 3.20. Panel superior: magnetización en función del campo externo para el set de parámetros $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}, J_{\text{RKKY}} = 0.9]$ a temperaturas $T = 0.03$ (en azul), $T = 0.17$ (en amarillo), $T = 0.21$ (en rojo), considerando hasta terceros vecinos. La línea punteada evidencia el plateau en $m = \frac{1}{2}$. Panel inferior: de izquierda a derecha, las configuraciones de espín para el mismo set de parámetros a campo $B = 0.2$ (órdenes checkerboard y stripes 2_2) y $B = 0.9$ (orden stripes 1_3).

Luego, se tomó $J_{\text{RKKY}} = 1.3$ y, nuevamente, se gráfico la magnetización en función del campo magnético B , tomando diferentes temperaturas, como se ve en la Fig. 3.21. Se observa la tendencia a formarse dos plateaux de magnetización $m = \frac{1}{3}$ y $m = \frac{5}{9}$ respectivamente. Para este caso, para definir los plateaux sería necesario bajar aún más la temperatura, lo cual se deja para trabajo futuro. Bajo el panel figuran tres configuraciones de espines, para los plateaux de $m = 0, \frac{1}{3}, \frac{5}{9}$.

En la figura (Fig. 3.22) se presenta el módulo de la magnetización y el parámetro de orden Φ_3 , en función de la temperatura, para distintos valores de J_{RKKY} y B . En el gráfico de magnetización se observa que, para $J_{\text{RKKY}} = 0.9$, a campo $B = 0.1$, el sistema a baja temperatura tiende a magnetización $m = 0$, a campo $B = 0.8$ tiende a $m = \frac{1}{2}$ y a campo $B = 1$ tiende a $m = 1$.

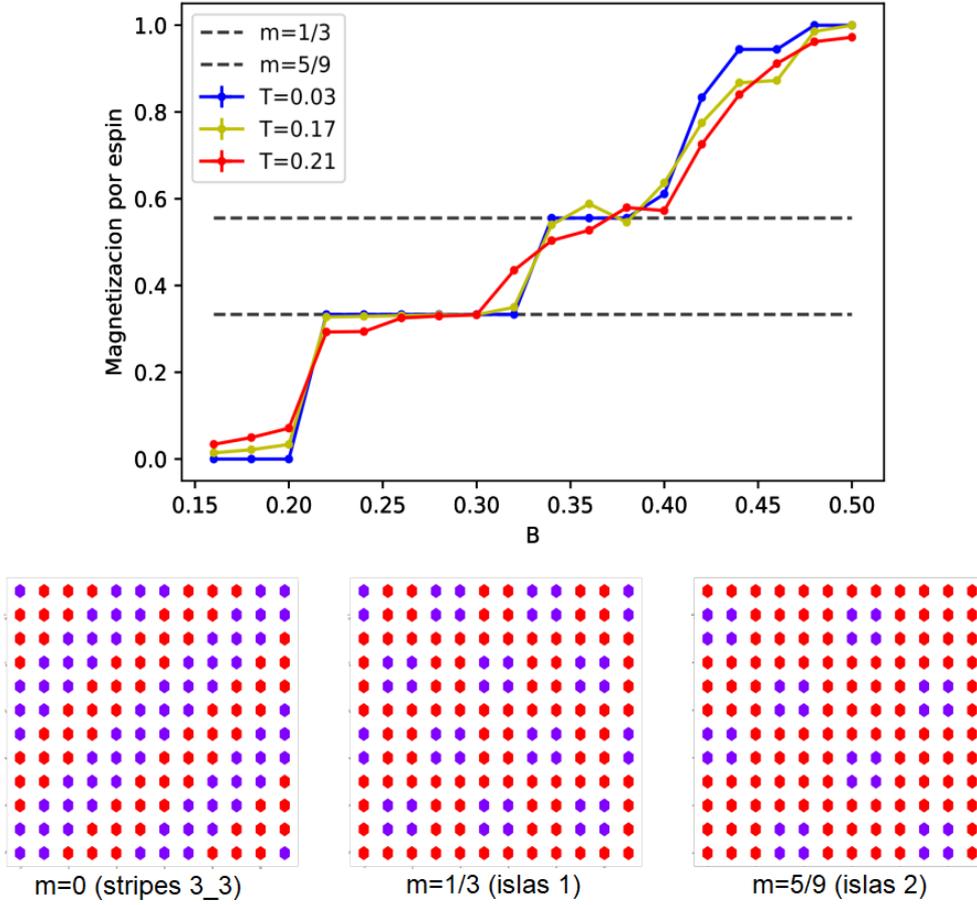


Figura 3.21. Panel superior: magnetización en función del campo externo para el set de parámetros [$J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}, J_{\text{RKKY}} = 1.3$] a temperaturas $T = 0.03$ (en azul), $T = 0.17$ (en amarillo), $T = 0.21$ (en rojo), considerando hasta quintos vecinos. Las líneas punteadas evidencian los plateaux en $m = \frac{1}{3}$ y $m = \frac{5}{9}$. Panel inferior, de izquierda a derecha, las configuraciones de espín para el mismo set de parámetros a campo $B = 0.16$ (orden stripes 3_3), $B = 0.28$ (orden islas 1) y $B = 0.36$ (orden islas 2).

Se obtuvo entonces, al considerar hasta quintos vecinos en el acoplamiento RKKY, que el diagrama de fases sufre un cambio importante, con fases y plateaux de magnetización nuevos. También se logró ordenar los sistemas que, considerando hasta terceros vecinos en la interacción, no se habían logrado ordenar. Es decir, que al agregar cuartos y quintos vecinos en la interacción RKKY, se logró explorar un diagrama de fases mucho más interesante y esto motiva a seguir trabajando, agregando en un futuro más vecinos, con la esperanza de seguir encontrando nuevas fases y plateaux de magnetización exóticos.

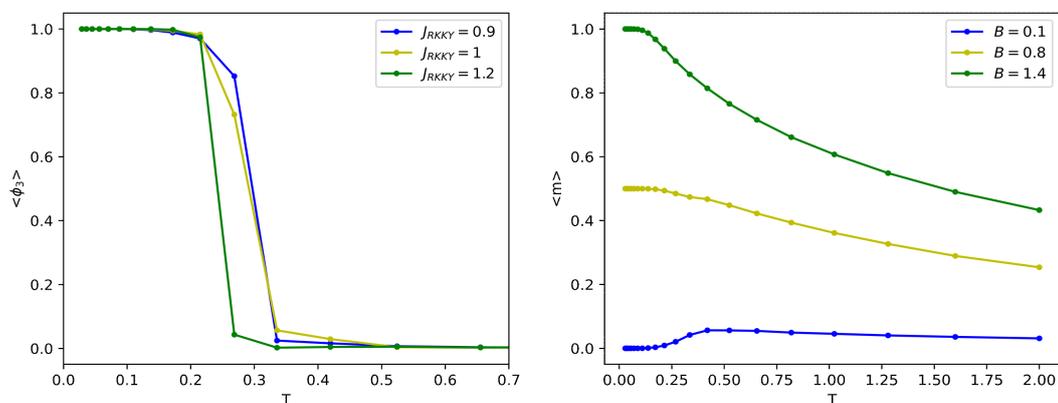


Figura 3.22. Parámetro de orden y magnetización para el set $[J = 1, k_F = \frac{\pi}{2}]$ teniendo en cuenta hasta quintos vecinos en el acoplamiento RKKY. A la izquierda se presenta el parámetro de orden Φ_3 para $J_{\text{RKKY}} = 0.9$ (en azul), $J_{\text{RKKY}} = 1$ (en amarillo) y $J_{\text{RKKY}} = 1.2$ (en verde) a campo $B = 0.2$. A la derecha el módulo de la magnetización para $J_{\text{RKKY}} = 0.9$ a campo $B = 0.1$ (en azul), $B = 0.8$ (en amarillo) y $B = 1.4$ (en verde).

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo se estudió el efecto de la competencia entre interacciones RKKY y acoplamiento directo para espines Ising en la red cuadrada. Se consideró un modelo con tres términos: uno de acoplamiento directo a primeros vecinos ($|J| = 1$), otro de acoplamiento RKKY y el último de interacción con un campo magnético externo. Se estudió el sistema en cuatro regiones en donde se maximiza la competencia entre interacciones RKKY y la interacción de intercambio directa a primeros vecinos, es decir, alrededor de valores de los parámetros J_{RKKY} y k_F que anulan el valor de la constante efectiva a primeros vecinos, suma del acoplamiento directo y el RKKY.

Para estudiar las fases de baja temperatura, se realizaron simulaciones con el método de Monte Carlo Metropolis. Se analizaron las configuraciones de espines a baja temperatura del sistema. Se describieron las fases ordenadas encontradas y se armaron parámetros de orden para caracterizar a cada una de las fases ordenadas a campo $B = 0$.

Para acoplamiento de intercambio J ferromagnético se estudió el caso con $B = 0$. En la primera región, con $J_{\text{RKKY}} > 0$ $k_F = \pi$, se observó que la temperatura crítica tiene un mínimo en $J_{\text{RKKY}} = 1$ y que para valores menores el orden a baja T es ferromagnético, mientras que para valores mayores es de tipo Néel. En la segunda región, con $J_{\text{RKKY}} < 0$ y $k_F = \frac{\pi}{2}$, se observó que la temperatura crítica tiene un mínimo en $J_{\text{RKKY}} = -1$ donde el orden a baja T es colineal. Para valores menores de J_{RKKY} el orden es de tipo Néel y para valores mayores el orden es ferromagnético.

Para el caso de acoplamiento directo antiferromagnético, para $k_F = \pi$ y $J_{\text{RKKY}} < 0$, a campo magnético $B = 0$, se observó que la temperatura crítica aumenta con J_{RKKY} y el estado ordenado es stripes 1_1 para todo el rango de valores J_{RKKY} estudiados.

En la última región, con $J_{\text{RKKY}} > 0$ y $k_F = \frac{\pi}{2}$, a baja temperatura se encontraron plateaux de magnetización $m = 0$ donde la configuración de espines es del tipo checkerboard/stripes 2_2 (dos tipos de configuraciones que tienen la misma energía), como se observa en la Fig. 3.14, y plateaux de magnetización $m = \frac{1}{3}$, con configuración de espines del tipo stripes 1_2 (Ver Fig. 3.14). Además se vió que a campo $B = 0$, para $J_{\text{RKKY}} = 0.8$ y 1.3 el sistema no se ordena. A partir de esto, se consideraron interacciones RKKY hasta quintos vecinos. Primeramente, las interacciones adicionales estabilizaron fases ordenadas en los puntos donde antes no parecía ordenarse. Además, se halló una mayor variedad de fases ordenadas. Se encontraron plateaux de magnetización $m = 0$, con órdenes de tipo Néel, checkerboard/stripes 2_2 y un nuevo tipo de fase, stripes 3_3 (Ver Fig. 3.21), para distintos valores de J_{RKKY} . También se hallaron plateaux de magnetización en $m = \frac{1}{3}$, con orden del tipo “islas 1” que se observa en la Fig. 3.21 (diferente al hallado anteriormente), $m = \frac{1}{2}$ con orden del tipo stripes 1_3 (Ver Fig. 3.20) y por último un plateau en $m = \frac{5}{9}$, con orden del tipo “islas 2” (Ver Fig. 3.21).

De los resultados, se concluye la importancia del efecto de incluir interacciones RKKY

4. Conclusiones

para estabilizar nuevos tipos de órdenes a baja temperatura. En las regiones estudiadas, donde la competencia es evidente, ya que se anula el acoplamiento efectivo a primeros vecinos, se observa una gran variedad de fases, algunas exóticas, y diversos plateaux de magnetización.

Como continuación de este trabajo, se proyecta considerar más vecinos en la interacción RKKY con tamaños de red más grandes, para estudiar la estabilidad de las fases encontradas. También se espera bajar más la temperatura en las simulaciones Monte Carlo, para obtener mejor resolución de los plateaux de magnetización y armar parámetros de orden para las fases encontradas a $B > 0$.

Bibliografía

- [1] A. Kalz, A. Honecker, M. Moliner, *Physical Review B* **84** (2011).
- [2] J. L Hemmen, I. Morgenstern, *Lecture notes in physics* **192** (Springer, 1983).
- [3] K. H. Fisher, J. A. Hertz, *Spin Glasses* (Cambridge, 1991).
- [4] H. T. Diep, *Frustrated spin systems, 2nd edition* (World scientific, 2013).
- [5] C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila, *Introduction to frustrated magnetism* (Springer, 2011).
- [6] A. P. Ramirez, *Annual review of materials science* **24** (1994).
- [7] I. Dzyaloshinskii, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **4** (1958).
- [8] T. Moriya, *Review Letters* **4** 1960.
- [9] H. P. Melko, M. J. P. Gingras, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, R1277 (2004).
- [10] S. T. Bramwell, M. J. Harris, B. C. den Hertog, M. J. P. Gingras, J. S. Gardner, D. F. McMorrow, A. R. Wildes, A. L. Cornelius, J. D. M. Champion, R. G. Melko, T. Fennell, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001).
- [11] R. A. Borzi, F. A. Gómez Albarracín, H. D. Rosales, G. L. Rossini, A. Steppke, D. Prabhakaran, A. P. Mackenzie, D. C. Cabra, S. A. Grigera, *Nature communications* **7**, 12592 (1954).
- [12] M. A. Ruderman, C. Kittel, *Physical Review* **96** (1954).
- [13] T. Kasuya, *Progress of Theoretical Physics* **16** (1956).
- [14] K. Yosida, *Physical Review* **106**, 893 (1957).
- [15] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, P. Böni, *Science* **323** (2011).
- [16] J Ping Liu, Zhidong Zhang, and Guoping Zhao. *Skyrmions: topological structures, properties, and applications*. CRC Press, 2016.

BIBLIOGRAFÍA

- [17] A. Abanov, V. L. Pokrovsky, *Phys. Rev. B* **58**, R8889(R) (1998).
- [18] A. Bezvershenko, A. K. Kolezhuk, B. A. Ivanov, *Phys. Rev. B* **97** (2018).
- [19] S. Hayami, R. Ozawa, Y. Motome, *Phys. Rev. B* **97** (2018).
- [20] J. Feng, L. Wang, A. Zhangc, J. Jia, Y. Shi, X. Wang, R. Yub, J. Zhange, E. W. Plummere, Q. Zhanga *Proceedings of the National Academy of Sciences* **116**, (2019).
- [21] P. W. Anderson, E. I. Blount, *Phys. Rev. Lett.* **14**, (1965).
- [22] C. N. Yang, *Physical Review* **85**, (1952).
- [23] K. Huang, *Statistical Mechanics, 2nd Edition* . (John Wiley and Sons, New York, 1987).
- [24] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Introduction to solid state physics*. (Saunders College, Philadelphia, 1976).
- [25] S. Blundell, *Magnetism in Condensed Matter*. (Oxford University Press, New York, 2001).
- [26] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*. (Wiley, New York, 1996).
- [27] S. H. Simon, *The Oxford solid state basics* . (Oxford University Press, New York, 2013).
- [28] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **79** (1950).
- [29] R. M. Liu, W. Z. Zhuo, S. Dong, X. B. Lu, X. S. Gao, M. H. Qin, J. M. Liu, *Phys. Rev.* **93** (2016).
- [30] J. F. Sadoc, *Geometrical Frustration* (Cambridge University Press, 1999).
- [31] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. (Oxford University Press. Inc., New York, 1999).
- [32] L. Pili, S. A. Grigera, *Physical Review B* **99**. (2019).