

Modelado de películas magnéticas fuertemente anisotrópicas acopladas ferromagnéticamente

Autor: Paula Silvina Pagliaro

Directora: Marisa Alejandra Bab

Codirector: Gustavo Pablo Saracco

Trabajo de Diploma para la
Licenciatura en Física



Departamento de Física
Universidad Nacional de La Plata
Argentina
Julio de 2021

Agradecimientos

A mi familia, Nancy, Carlos, Migue, Nata y Carlita.

A mis amigas y compañeras de vida Ague, Lihuen, Lio e Isis y muy especialmente a Yani.

Resumen

Las propiedades de un sistema magnético cambian notablemente cuando una o más de sus dimensiones es de escala nanométrica. El estudio de este tipo de sistemas ha despertado gran interés por sus potenciales aplicaciones tecnológicas y ha sido impulsado recientemente por el avance de las técnicas de formación de estructuras nanométricas.

En este trabajo se estudió el comportamiento de un sistema multicapa consistente en dos películas magnéticas ultradelgadas, acopladas, separadas por una capa no magnética. Estas películas se caracterizaron por poseer una fuerte anisotropía perpendicular al plano de las mismas. Se modelaron dichas películas como redes cuadradas discretas con espines clásicos tipo Ising y se consideraron interacciones de intercambio a primeros vecinos e interacciones dipolares entre espines de una misma capa, así como interacciones de intercambio entre capas. Es conocido que la competencia entre interacciones de intercambio y dipolares produce frustración, generando variadas estructuras de dominios y ricos diagramas de fases.

En este trabajo se buscó caracterizar las transiciones de fase para determinados valores de las constantes de intercambio, dipolar y de acoplamiento entre películas. Para esto, se analizó el grado de acoplamiento entre las mismas, las estructuras emergentes y las transiciones de fase, en función de las interacciones y la temperatura.

El estudio del sistema se realizó mediante simulaciones Monte Carlo, utilizando para la caracterización de las transiciones de fase el escalado dinámico en el régimen de tiempos cortos del parámetro de orden del sistema y sus momentos. Con este mismo fin se incorporó además el análisis de tiempo de relajación fuera del equilibrio del parámetro de orden.

A partir de los resultados obtenidos fue posible determinar las temperaturas y el tipo de transición, así como los exponentes críticos en el caso de las transiciones continuas.

Índice

1. Introducción	7
2. Sistemas magnéticos	9
2.1. Energías de interacción	10
2.2. Anisotropía	12
2.3. Películas magnéticas ultrafinas	12
2.3.1. Películas magnéticas multicapa	13
3. Termodinámica de sistemas magnéticos	15
3.1. Transiciones de fase	16
3.2. Transiciones de fase continuas	17
3.3. Exponentes críticos	19
3.4. Teorías de escala	19
4. Modelado del sistema	21
4.1. Modelo de Ising con interacciones dipolares	21
4.2. Parámetro de orden de Booth	23
4.3. Modelado de películas multicapa	23
5. Metodología	25
5.1. El método Monte Carlo	25
5.2. El algoritmo de Metrópolis	27
5.3. Dinámica de tiempos cortos	28
5.3.1. Evolución desde un estado inicial desordenado	29
5.3.2. Evolución desde el estado fundamental	30
5.3.3. Aplicación al modelo de Ising con interacciones dipolares	31
5.4. Condiciones de contorno	31
5.5. Análisis de los tiempos de relajación fuera del equilibrio	32
6. Resultados y discusión	34
6.1. Caso no acoplado	34
6.2. Caso $J_1 = J_2 = 1, J_3 = 0,5$	35
6.3. Caso $J_1 = J_2 = 1,5, J_3 = 0,5$	40
6.4. Caso $J_1 = 1, J_2 = 1,5$	46
6.4.1. Acoplamiento débil entre capas	46
6.4.2. Acoplamiento moderado entre capas	50

6.5. Casos con acoplamiento fuerte	57
7. Conclusiones y perspectivas	59

1. Introducción

Las propiedades magnéticas de películas delgadas y multicapas son objeto de intensas investigaciones tanto teóricas como experimentales en la actualidad. El interés por una parte se debe a sus potenciales aplicaciones tecnológicas en dispositivos de espintrónica, memorias de acceso aleatorio, almacenamiento de datos y sensores de campo magnético, entre otros. Recientemente se han logrado importantes avances en las técnicas de crecimiento de películas y los métodos de caracterización con el fin de desarrollar nuevos materiales con propiedades específicas para dichas aplicaciones. Pero su estudio también ha posibilitado avanzar sobre problemas fundamentales y aun abiertos de la física de la materia condensada de sistemas magnéticos, tales como el rol de la competencia a nivel de las interacciones intra-atómicas (o intra-moleculares), así como la frustración que esta introduce, en el comportamiento mesoscópico y macroscópico de la materia. Estos sistemas presentan complejos diagramas de fases que exhiben una amplia variedad de ordenamientos magnéticos y transiciones de fase, y gran parte de los mismos han sido modelados mediante simulaciones Monte Carlo [1–6].

En este sentido, las películas magnéticas delgadas son capaces de generar dominios magnéticos caracterizados por constituir franjas de orientación alternada, en las cuales una componente de la magnetización es predominante, y apunta perpendicularmente al plano de la película. Estos ordenamientos han sido observados experimentalmente cuando existe una componente de la anisotropía perpendicular al plano de la película y dependen tanto de su espesor como de la temperatura [4, 7]. Un modelo realista de estos sistemas debe considerar, además de las interacciones de intercambio que son de corto alcance, las interacciones dipolares y anisotropías, dado que como consecuencia del teorema de Mermin y Wagner, las simetrías continuas no pueden romperse espontáneamente a temperatura finita en sistemas con interacciones de corto alcance con dimensión $d \leq 2$. De esta forma, la aparición del orden de largo alcance para $d = 2$ requiere la ruptura de simetría por anisotropía magnética. La naturaleza de la anisotropía magnética es determinada por una combinación entre factores como la estructura cristalina, la presencia de superficies, la forma del sistema y las interacciones dipolares, las cuales son inherentemente anisotrópicas. Las interacciones dipolares suelen ser ignoradas en los estudios teóricos de sistemas magnéticos, debido a la complejidad que estas introducen por su carácter de largo alcance en la resolución analítica, sin embargo, son estas interacciones las que hacen posible estabilizar el orden de

largo alcance en sistemas bidimensionales, así como también su competencia con las interacciones de intercambio las que determinan las estructuras de dominios. Por otra parte, los efectos de las interacciones magnéticas entre capas llevan a comportamientos acoplados con nuevas propiedades estructurales y magnéticas reportadas experimentalmente [7–9]. El comportamiento de estos sistemas no solo depende de las propiedades de las películas magnéticas, sino también del espesor de la película no-magnética [10].

En este trabajo se estudiaron películas magnéticas ultradelgadas fuertemente anisotrópicas, acopladas, conformando un sistema magnético bicapa, con una capa no-magnética entre dos capas ferromagnéticas, mediante modelos de partículas interactuantes. Para ello se modelaron las películas como redes discretas con espines clásicos tipo Ising orientados perpendiculares a la película. Se consideró un enfoque micromagnético incorporando al Hamiltoniano del modelo de Ising, inherentemente anisotrópico, además de la interacción de intercambio un término que tiene en cuenta las interacciones dipolares magnéticas. Comparando el comportamiento con el modelo de Ising con interacciones de corto alcance, la introducción de interacciones dipolares produce frustración cuyo origen no está dado por un desorden estructural sino por la competencia con las interacciones de intercambio. Dicha frustración rompe el orden ferromagnético llevando a un rico diagrama de fases que incluye, entre otras, fases con estructuras de dominios tipo franjas alternadas como las mencionadas. Este diagrama en su mayor parte ha sido determinado por simulaciones Monte Carlo [1, 2, 5, 6, 11–13]. El acoplamiento entre películas fue considerado ferromagnético y su intensidad se puede relacionar con el espesor de la película no-magnética.

El objetivo de este trabajo es estudiar el comportamiento magnético del modelo, determinando las estructuras de dominio estables a distintas temperaturas y caracterizando las transiciones de fase para valores selectos de las constantes de intercambio, dipolar y acoplamiento entre capas.

2. Sistemas magnéticos

A escala atómica, los momentos magnéticos intrínsecos (m) están principalmente asociados con el espín de los electrones, además de la contribución debida al movimiento orbital en torno a los núcleos y el espín nuclear. En la mayoría de los materiales estos momentos se cancelan al considerar todas las contribuciones, solo en algunos metales de transición el momento intrínseco resultante es no nulo. En un sistema material estos momentos son alterados por fluctuaciones térmicas llevando a un momento magnético promedio nulo en la fase paramagnética.

Para estudiar el comportamiento de un sistema de muchos espines, es útil definir la magnetización homogénea local $\vec{M}(\vec{r})$, que considera todas las contribuciones de los momentos m , separados en una escala de unos pocos nanómetros, tomando su valor medio en tiempo y posición. $\vec{M}(\vec{r})$ puede representar, por ejemplo, la magnetización de los dominios en un material ferromagnético. La magnetización, a escala macroscópica, se define como $\vec{M} = \sum_i \vec{M}_i V_i / \sum_i V_i$, donde la suma se realiza sobre los dominios con volumen V_i . A esta aproximación se la llama aproximación del continuo.

Por otra parte, se define el campo magnético \vec{B} como aquel generado por corrientes de conducción o cargas en movimiento, incluyendo aquellas asociadas al momento magnético intrínseco atómico. En condiciones magnetostáticas este campo satisface la ley de Ampere:

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0(\vec{J}_c + \vec{J}_m), \quad (1)$$

siendo \vec{J}_c la corriente de conducción e \vec{J}_m la corriente de magnetización asociada a la existencia de un medio magnetizado y μ_0 la permeabilidad de vacío.

El campo de intensidad magnética, \vec{H} , se define al considerar el efecto de campos en materiales. La relación entre los campos es

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}. \quad (2)$$

En el vacío esta relación se reduce a: $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$.

A su vez, \vec{H} puede pensarse como la suma de dos contribuciones

$$\vec{H} = \vec{H}_c + \vec{H}_m \quad (3)$$

con \vec{H}_c el campo debido a corrientes de conducción y \vec{H}_m el campo generado por distribuciones de magnetización, externas, o propias del material o sistema. \vec{H}_c se suele llamar campo disperso para referirse al campo generado por fuera del sistema y campo desmagnetizante (\vec{H}_d) en el interior del mismo. Este último depende de la forma del sistema considerado y se relaciona con la magnetización.

Considerando la ley de Gauss para el campo magnético:

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0. \quad (4)$$

Esto implica que $\nabla \cdot \vec{H} = -\nabla \cdot \vec{M}$. De esta forma, discontinuidades en la magnetización son fuentes del campo de intensidad magnética \vec{H} siendo este campo conservativo en ausencia de corrientes de conducción.

2.1. Energías de interacción

En la teoría para materiales ferromagnéticos, se puede considerar que existe un campo interno molecular, el cual dentro de una aproximación de campo medio se propone que es proporcional a la magnetización del material. Este campo interno se origina por las interacciones entre los espines del sistema, en particular con las interacciones de intercambio y dipolar.

Las interacciones de intercambio tienen un origen cuántico y están asociadas con la repulsión coulombiana entre electrones de átomos vecinos. Heisenberg propuso describir la energía asociada a esta interacción como una suma sobre espines clásicos, correspondientes a todos los pares de átomos ubicados en los sitios (i, j) de una red discreta, mediante el Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{int} = - \sum_{i < j} \mathcal{J}_{ij} \widehat{S}_i \cdot \widehat{S}_j, \quad (5)$$

donde $\widehat{S}_{i(j)}$ es un vector unitario cuya orientación continua se corresponde a la orientación del espín y \mathcal{J}_{ij} la constante de intercambio. Valores positivos de \mathcal{J}_{ij} indican interacciones ferromagnéticas, donde los espines tienden a alinearse en la misma dirección, mientras que $\mathcal{J}_{ij} < 0$ corresponde a interacciones antiferromagnéticas, donde los espines tienden a alinearse en direcciones opuestas. La interacción se simplifica si es de corto alcance, por ejemplo involucrando solo a átomos primeros vecinos, y si $\mathcal{J}_{ij} = J$ es constante. En

tal caso es

$$\mathcal{H}_{int} = -J \sum_{i < j} \widehat{S}_i \cdot \widehat{S}_j, \quad (6)$$

La energía de interacción dipolar entre dos momentos magnéticos separados una distancia \vec{r}_{ij} entre sí, en función de \widehat{S}_i , esta dada por el Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{dip} = g \sum_{i < j} \frac{\widehat{S}_i \cdot \widehat{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\widehat{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\widehat{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5}, \quad (7)$$

con g la constante dipolar. Cabe aclarar que para el caso de redes bidimensionales y fuerte anisotropía, de modo que se puedan considerar espines tipo Ising en las cuales los espines están orientados perpendicularmente al plano de la red, el segundo término se anula.

Como se menciona en la introducción, las interacciones dipolares, si bien en general son de menor magnitud que las interacciones de intercambio, contribuyen al orden de largo alcance del sistema. Por otro lado, estas interacciones explican en parte el fenómeno de la formación de dominios. Los dominios causan que, por ejemplo, una pieza de hierro normalmente se encuentre desmagnetizada, a pesar de que su temperatura de Curie esta por encima de los 1000K. Sin embargo, la misma pieza puede ser atraída por un campo magnético y ser magnetizada. Las interacciones de intercambio decaen en forma exponencial con la distancia (r_{ij}) entre espines mientras que las interacciones dipolares decaen mucho mas lentamente, con $1/r_{ij}^3$. Como resultado de esto, cuando se considera una muestra relativamente grande, con un gran numero de espines, las interacciones dipolares se vuelven significativas. Una magnetización uniforme en el material, es decir, con espines alineados, implicaría una gran energía dipolar (magnetostática). Para reducir esta energía el material se divide en regiones uniformemente magnetizadas de tamaño macroscópico, llamadas dominios, cuyas magnetizaciones apuntan en diversas direcciones, cancelándose en el sistema de conjunto. La formación de dominios en el material ferromagnético incrementa la energía de intercambio entre espines vecinos de dominios distintos, sin embargo, como esta interacción es de corto alcance, este incremento involucra solo a los espines de las fronteras de los dominios y en el material completo la energía resulta menor con un ordenamiento de dominios [14].

2.2. Anisotropía

En general los materiales ferromagnéticos tienen direcciones preferenciales de magnetización de sus dominios microscópicos $\vec{M}(r)$. Cuando no se aplica un campo externo los dominios tienden a alinearse a lo largo de uno o más ejes. Esto implica que hay direcciones preferenciales de magnetización espontánea y, por otro lado, que al aplicar un campo externo requiere más energía alinear los dominios si dicho campo externo no es paralelo al eje preferencial, denominado eje de fácil magnetización. Esta característica se denomina anisotropía y la tendencia de los dominios a alinearse en ausencia de campo externo se representa con la energía de anisotropía E_a

$$E_a = K_u \sin^2(\theta), \quad (8)$$

con θ el ángulo entre el eje de fácil magnetización y $\vec{M}(r)$ y K_u es la constante de anisotropía efectiva.



Figura 1: La magnetización $\vec{M}(r)$ no es necesariamente paralela al campo externo \vec{H}_c , a menos que este sea paralelo al eje de fácil magnetización.

La anisotropía depende de las características del material: su forma, estructura cristalina, tamaño, rugosidad de las superficies. Varía con la temperatura y tiende a cero a la temperatura de Curie si el campo externo es nulo.

2.3. Películas magnéticas ultrafinas

En este trabajo nos centramos en el estudio de películas magnéticas ultrafinas, es decir sistemas donde una de sus dimensiones es de escala nanométrica.

Las propiedades magnéticas de películas ultrafinas pueden diferir considerablemente de las observadas en materiales masivos. Estas propiedades se

generan por los efectos superficiales y de interfase de la película con su entorno y la interacción con el sustrato (en el caso de películas ubicadas sobre sustratos macroscópicos).

En este tipo de películas se han observado ordenamientos de dominios magnéticos que forman franjas alternadas con magnetizaciones opuestas, cuando existe una componente de anisotropía perpendicular a la película, de manera que:

$$Q = \frac{K_{\perp}}{1/2\mu_0 M_s^2} > 1 \quad (9)$$

donde M_s es la magnetización de saturación y K_{\perp} la constante de anisotropía perpendicular [7, 15]. Esto significa que la anisotropía perpendicular supera a la anisotropía de forma relacionada a la energía magnetostática. En este caso los momentos magnéticos tienden a alinearse perpendicularmente al plano de la película, presentando una fuerte anisotropía.

En el modelado de estas películas se han considerado espines tipo Ising para emular la fuerte anisotropía y, como ya se dijo, tanto interacciones de intercambio como dipolares. Cuando ambas interacciones están presentes el sistema presenta frustración y pueden presentarse distintos tipos de ordenamientos dependiendo de la relación entre las interacciones de intercambio y dipolar, que se caracterizara con el parámetro $\delta = J/g$, y la temperatura. Estos ordenamientos incluyen a bajas temperaturas las fases antiferromagnética y de franjas de ancho $h_n = n$, alternadas con magnetizaciones orientadas en direcciones opuestas. A temperaturas altas se producen transiciones hacia la fase tetragonal líquida (TL), que dependiendo del valor del parámetro δ pueden ser en forma directa o a través de una fase intermedia que presenta orden orientacional pero no posicional conocida como Ising-nemática (NM) [6, 12, 16]. Estos aspectos se desarrollan mas detalladamente en la sección 5.

2.3.1. Películas magnéticas multicapa

En sistemas multicapa, formados por múltiples películas alternadas entre ferromagnéticas y no-ferromagnéticas, se ha observado que el acoplamiento entre las mismas oscila entre ferromagnético y antiferromagnético dependiendo del espesor de la capa no ferromagnética [10].

Si la capa no-magnética es metálica, este comportamiento puede ser relacionado con una interacción de intercambio indirecta mediada por electrones de conducción, RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya y Yosida), la cual si se

consideran los espines de las interfases está dada por:

$$J_{RKKY} \sim \cos(2k_f r)/r^2, \quad (10)$$

donde se supone una superficie de Fermi esférica de radio k_f y r es el espesor de capa no magnética [17].

Experimentalmente se ha observado que los sistemas compuestos por al menos una capa magnéticamente blanda acoplada con una dura, conocidos como *exchange spring magnets*, combinan propiedades de la fase dura (como una alta estabilidad térmica) con las de la fase blanda (bajo campo coercitivo y alta permeabilidad). Dependiendo del espesor la capa blanda puede acoplarse rígidamente al comportamiento de la dura [8]. Por otra parte, al poner en contacto dos capas magnéticamente blandas con campos coercitivos distintos, éstas se acoplan dando lugar a un comportamiento común evidenciado por los ciclos de histéresis, que en principio no corresponde al de uno u otro material; así como estructuras de dominios tipo franjas con modulaciones superpuestas dependiendo de los espesores de las capas [7].

Una propiedad de las películas magnéticas es que no presentan campo disperso para ninguna dirección de magnetización si ésta es uniforme. Esto puede deducirse de las condiciones de contorno para los campos \vec{B} y \vec{H} en la frontera entre dos medios, es decir entre la película y su entorno [18]. Por este motivo, al modelar sistemas bicapa uniformemente magnetizadas no se consideraron interacciones dipolares entre las mismas.

3. Termodinámica de sistemas magnéticos

En el estudio de transiciones de fase uno de los ejemplos más conocidos es la transición del estado ferromagnético a paramagnético de un material ferromagnético a la temperatura de Curie (T_c). El material no está magnetizado a $T > T_c$ cuando no se aplica un campo externo, y si se lo expone a un campo débil, se magnetiza en forma proporcional al dicho campo. Para temperaturas por debajo de T_c el material está magnetizado aun en ausencia de campo externo.

La descripción de las transiciones de fase a nivel microscópico se realiza en mecánica estadística considerando modelos de espines interactuantes.

Para sistemas magnéticos resulta adecuada la estadística de Maxwell-Boltzmann puesto que se considera que los espines, al estar bien localizados, son distinguibles. Podemos considerar el ensamble canónico, cuya función de partición es

$$Z = \text{Tr}\{e^{-\mathcal{H}/k_B T}\} = \sum_r e^{-E_r/k_B T}, \quad (11)$$

donde T es la temperatura, k_B es la constante de Boltzmann y \mathcal{H} el Hamiltoniano del sistema. La sumatoria se realiza sobre todos los estados r con energía E_r .

Las propiedades termodinámicas del sistema pueden obtenerse a partir de la energía libre y sus derivadas. Se define la energía libre magnética como

$$F(T, H_c, V, N) = -k_B T \ln(Z), \quad (12)$$

donde H_c es la intensidad de campo magnético externo, V el volumen y N el número de moles. Desde las derivadas se obtienen, por ejemplo, la magnetización M (que es el momento magnético en la dirección del campo) y la susceptibilidad isotérmica χ_T como

$$M = -\frac{1}{\mu_0 V} \left(\frac{\partial F}{\partial H_c} \right)_{TVN} = \frac{1}{ZV} \text{Tr}\left\{ \sum_{i=1}^N \mu_i e^{-\mathcal{H}/k_B T} \right\} \quad (13)$$

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H_c} \right)_{TVN} = -\frac{1}{\mu_0 V} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial H_c^2} \right)_{TVN}, \quad (14)$$

donde μ_i es el momento magnético que se relaciona con M según $M = \mu_i/V$. A campos externos débiles se puede aproximar la susceptibilidad a campo

cero como

$$M = \chi_T(0)H \quad (15)$$

De las ecuaciones 13 y 14 puede obtenerse una relación para la $\chi_T(0)$

$$\chi_T(0) = \frac{\mu_0 V}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)_{H=0}, \quad (16)$$

la cual es un caso particular del teorema de Fluctuación-Disipación y nos será de utilidad para evaluar la susceptibilidad mediante simulaciones Monte Carlo. Para mayor detalle ver [19].

3.1. Transiciones de fase

Una transición de fase ocurre cuando aparece una singularidad en algún potencial termodinámico y se detectan por una discontinuidad de las derivadas relacionadas con las variables extensivas o las funciones respuesta. Cuando se presenta una discontinuidad finita en la derivada primera de la energía libre magnética (o de Gibbs) la transición se clasifica de primer orden. Ejemplos típicos de este tipo son las transiciones liquido-gas en un fluido por debajo de la temperatura crítica. Cuando las derivadas primeras son continuas pero aparece alguna discontinuidad o singularidad en las derivadas segundas, la transición se denomina de segundo orden o continua.

El caso de sistemas ferromagnéticos, que presentan dos posibles orientaciones de la magnetización, es ilustrativo ya que en presencia de un campo externo H_c , paralelo al eje fácil, se pueden observar tanto transiciones de primer orden como continuas. Existe una línea de transiciones de primer orden a campo nulo $H = 0$ desde $T = 0$ hasta el punto crítico $T = T_c$. Para $T < T_c$, la energía libre magnética es no-analítica como puede verse en la figura 2a) presentando una discontinuidad en sus derivadas primeras a $H = 0$. La figura 2b) muestra el salto de la magnetización, indicando una transición de primer orden. Cuando $T > T_c$, M varía en forma continua con H . El límite entre ambos comportamientos está dado por $T = T_c$ (y $H = 0$); en este caso se observa que la magnetización no presenta discontinuidad, pero su derivada (χ_T) diverge, como puede observarse por la pendiente infinita de la curva en $H = 0$ y en la figura 2c, tratándose entonces una transición de fase continua.

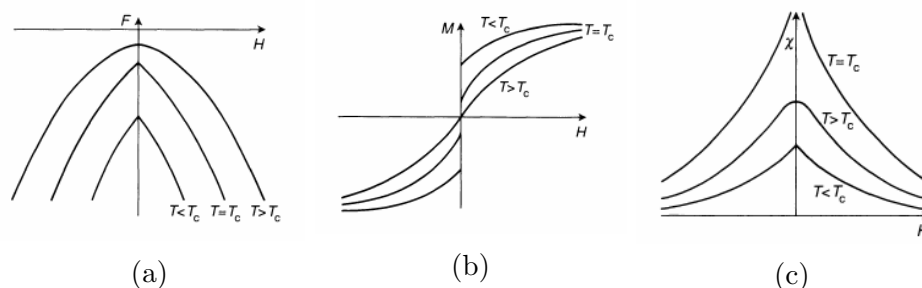


Figura 2: a) *Energía libre en función del campo externo H* ; b) *dependencia de la magnetización M con el campo H* ; c) *dependencia de la susceptibilidad isotérmica χ_T con el campo H*

3.2. Transiciones de fase continuas

Una de las transiciones de fase continuas más estudiadas es la transición ferro-paramagnética, de materiales tales como el hierro, cobalto o níquel, a la temperatura de Curie, dicha temperatura determina el punto crítico (T_c). Se observa que a temperaturas mayores que T_c el material no está magnetizado (se encuentra en su fase paramagnética), y si se aplica un campo externo la magnetización resulta proporcional a dicho campo. A temperaturas menores que T_c el material se magnetiza aun en ausencia de campo externo. El cambio en la magnetización, entre las dos fases, se da de manera continua, no hay un salto abrupto.

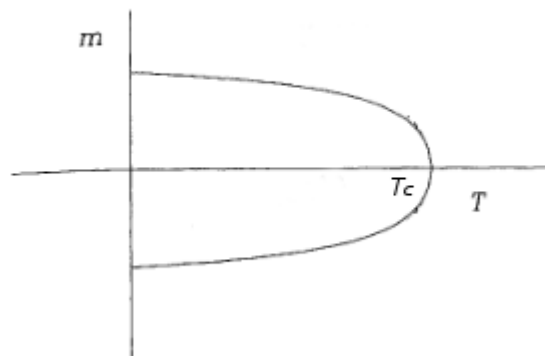


Figura 3: Dependencia de la magnetización con la temperatura.

En una transición continua puede identificarse una cantidad, llamada parámetro de orden (ϕ), que en promedio se anula para la fase correspondiente a $T > T_c$, y es distinto de cero para la fase de baja temperatura $T < T_c$, y se anula en el punto crítico $T = T_c$. En forma general, el parámetro de orden puede depender del tiempo y la posición cuando el sistema evoluciona hacia estados de equilibrio o estacionarios en el caso de sistemas fuera de equilibrio. Sin embargo una vez alcanzados estados de equilibrio el mismo depende de los parámetros que controlan la transición, en nuestro caso T y H .

No existe una regla general para definir dicho parámetro, depende del sistema estudiado, y en muchos casos puede resultar muy difícil hallar una cantidad que cumpla las condiciones [20]. En la transición ferro-paramagnética descrita más arriba el parámetro de orden es la magnetización. En el caso de las películas que se estudiarán en esa tesis se definirá un parámetro de orden relacionado al orden orientacional [13].

Para un sistema isotrópico se puede definir en general la función de correlación entre dos puntos, separados una distancia r , como

$$G(r) = \langle \phi(0) \cdot \phi(r) \rangle \quad (17)$$

Por debajo del punto crítico, $G(r)$ se vuelve grande para todos los valores de r . Resulta conveniente definir, para poder evaluar las fluctuaciones del parámetro de orden, la función de correlación conectada

$$G_c(r) = \langle \phi(0) \cdot \phi(r) \rangle - |\langle \phi \rangle|^2 \quad (18)$$

Ambas funciones coinciden para $T > T_c$ ya que en ese caso es $\langle \phi \rangle = 0$, mientras que por debajo de T_c , $G_c(r)$ permite evaluar el apartamiento respecto del valor medio de ϕ . Cerca del punto crítico, para $0 < \epsilon \ll 1$ ($\epsilon = (T - T_c)/T_c$ es la temperatura reducida), y valores grandes de r , se comporta como

$$G_c(r) \sim e^{-r/\xi}, \quad (19)$$

ξ se denomina longitud de correlación espacial [20].

La longitud de correlación da una idea de la longitud de escala a la cual las propiedades de una porción del sistema difieren de las del sistema completo. Es la distancia a la cual las fluctuaciones de los grados de libertad microscópicos están muy correlacionadas; aquellas fluctuaciones que se produzcan en porciones del sistema que se encuentren a distancias mayores que la longitud de correlación entre si estarán efectivamente desconectadas.

En una transición de fase continua la longitud de correlación diverge, es decir, las fluctuaciones están correlacionadas a cualquier distancia. Esto fuerza al sistema completo a estar en una única fase crítica [21].

3.3. Exponentes críticos

El comportamiento de un sistema en equilibrio cerca del punto crítico puede describirse con un conjunto de índices llamados exponentes críticos. A modo general, puede plantearse el comportamiento asintótico de una función $F(\epsilon)$ cerca del punto crítico como

$$F(\epsilon) \sim |\epsilon|^\lambda, \quad (20)$$

donde λ se denomina exponente crítico [22]. Se introducen los exponentes críticos para la magnetización y susceptibilidad isotérmica, a campo nulo, según

$$M(\epsilon) \sim (-\epsilon)^\beta, \quad (21)$$

$$\chi_T(\epsilon) \sim |\epsilon|^{-\gamma}, \quad (22)$$

Mientras que la longitud de correlación escala con el exponente ν como

$$\xi(\epsilon) \sim |\epsilon|^{-\nu}, \quad (23)$$

3.4. Teorías de escala

Los fenómenos críticos presentan divergencias en forma de leyes de potencia, con exponentes críticos característicos. Dichos exponentes no dependen de las propiedades microscópicas del sistema, sino de propiedades globales tales como la dimensión espacial del sistema, la del parámetro de orden y el alcance de las interacciones; de esa forma definen clases de universalidad. Además, los exponentes críticos no son independientes entre si sino que cumplen una serie de relaciones, llamadas leyes de escala, entre ellas las igualdades de Rushbrooke, Griffiths y Fisher.

El hecho de que existan clases de universalidad indica que debe haber una relación general en la región crítica que es común a sistemas de diversa naturaleza, más allá de los detalles microscópicos de cada uno. Puesto que las funciones respuesta se derivan de la energía libre, con excepción de la función de correlación, la universalidad además sugiere que la energía libre debe tener una forma particular en la región crítica. Ya que la longitud

de correlación diverge en el punto crítico, se asume que es la única escala relevante en el sistema y determina la forma de las funciones termodinámicas. Es decir, las propiedades que determinan las funciones termodinámicas ocurren a una escala del orden de la longitud de correlación y los detalles microscópicos del sistema que varíen en escalas $\xi \ll 1$ son irrelevantes. Si se efectúa una variación de los parámetros termodinámicos en las cercanías del punto crítico, de manera que el sistema se acerque a dicho punto, ξ crece y los detalles microscópicos pasan a tener menos importancia aun, es decir el sistema se comporta igual, pero a otra escala. De esta forma, un cambio en los parámetros termodinámicos, en el entorno del punto crítico, implica un cambio de escala. Se espera entonces que la energía libre no cambie su forma, sino que cambie su escala a medida que los valores de los parámetros se acercan a los del punto crítico.

Las funciones homogéneas generalizadas son funciones invariantes ante cambios de escala. Se define una función homogénea generalizada como

$$f(\lambda^{a_1}x_1, \lambda^{a_2}x_2, \dots, \lambda^{a_n}x_n) = \lambda f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (24)$$

donde a_1 y λ son números reales. Las leyes de potencia son un tipo de funciones homogéneas generalizadas y en el caso particular de funciones de una variable, son las únicas funciones homogéneas.

Como esta ecuación se cumple para cualquier λ es posible reescribirla tomando $\lambda^{a_1}x_1 = 1$, es decir, $\lambda = x_1^{-1/a_1}$

$$f(\lambda^{a_1}x_1/(\lambda^{a_1}x_1), \lambda^{a_2}x_2/(\lambda^{a_1}x_1), \dots, \lambda^{a_n}x_n/(\lambda^{a_1}x_1)) = x_1^{-1/a_1} f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (25)$$

Una propiedad importante de las funciones homogéneas es que sus derivadas también son funciones homogéneas.

Widom propuso escribir la energía libre $f(x_1, x_2, \dots)$ en las cercanías del punto crítico como una función con dos contribuciones, una parte regular f_r , que es una función analítica de los parámetros, y una parte singular f_s , que es una función homogénea generalizada

$$f(x_1, x_2, \dots) = f_r(x_1, x_2, \dots) + f_s(x_1, x_2, \dots) \quad (26)$$

La parte regular puede suponerse constante en la región crítica. Derivando las funciones termodinámicas a partir de f_s , pueden demostrarse las leyes de escala para los exponentes críticos.

4. Modelado del sistema

4.1. Modelo de Ising con interacciones dipolares

El estudio de las películas magnéticas ha permitido caracterizar las fases que se presentan en estos sistemas. Gran parte del conocimiento teórico sobre las mismas se obtuvo mediante simulaciones Monte Carlo. Como se mencionó en la introducción, para el modelado de una película magnética ultrafina fuertemente anisotrópica, resulta conveniente utilizar el modelo de Ising bidimensional con interacciones dipolares. El modelo de Ising puede considerarse un caso particular del modelo de Heisenberg donde la orientación de los espines se restringe a un eje, permitiendo solo dos orientaciones ($S_i = \pm 1$). El Hamiltoniano esta dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + g \sum_{i,j} \frac{S_i S_j}{r_{i,j}^3} \quad (27)$$

Analizando el comportamiento del sistema según la relación entre las constantes de las interacciones de corto alcance y dipolar, $\delta = J/g$, se ha encontrado que para una red cuadrada su estado fundamental corresponde a una fase antiferromagnética si $\delta < 0,425$, mientras que para valores $\delta > 0,425$ presenta una serie de franjas alternadas, magnetizadas en direcciones opuestas, y dirigidas a lo largo de uno de los dos ejes principales de la red (ver figura 4). Estas franjas se caracterizan por tener un ancho h_n constante (h_n indica franjas de ancho $h = n$), cuyo valor se incrementa en números enteros consecutivos a medida que aumenta δ [1, 5]. De esa forma, se ha sido posible

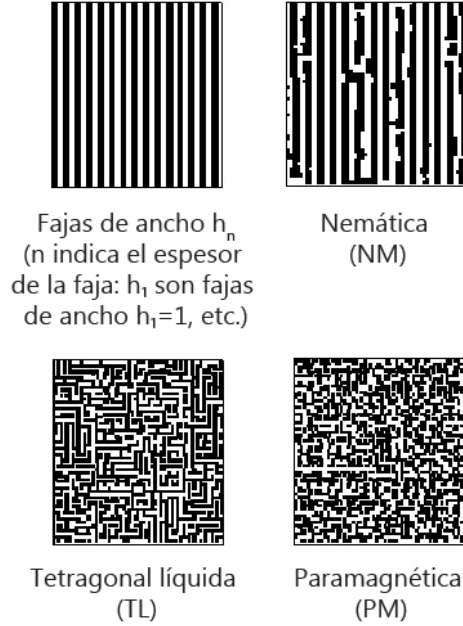


Figura 4: Ordenamientos magnéticos correspondientes al modelo de Ising con interacciones dipolares en una red cuadrada.

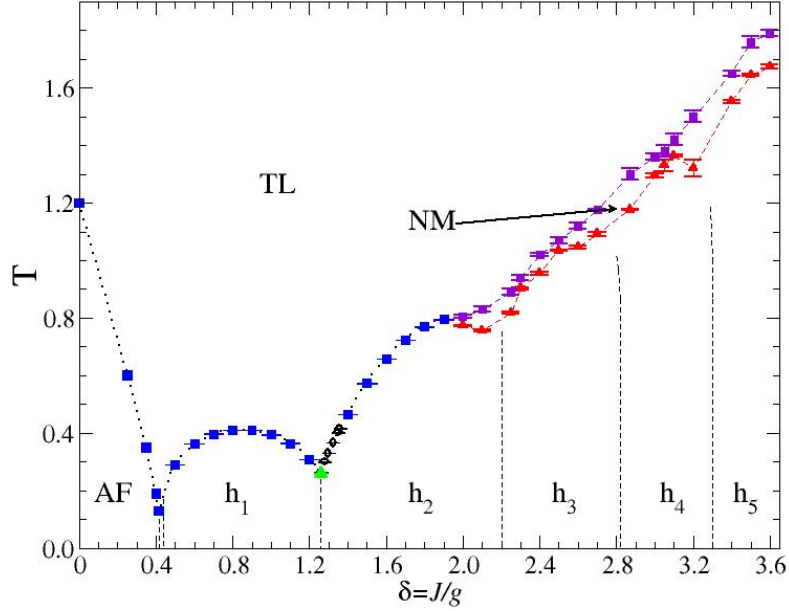


Figura 5: Diagrama de fases en el plano T - δ para el modelo Ising con interacciones dipolares utilizado para modelar una monocapa.

establecer numéricamente que las interacciones dipolares generan frustración en el sistema, rompiendo el orden ferromagnético.

El diagrama de fases en el plano T - δ se muestra en la figura 5 [12]. En general, a bajas temperaturas se observan fases correspondientes al estado fundamental descriptas.

A temperaturas mayores el sistema va perdiendo orden y presenta transiciones hacia el resto de las fases mostradas de la figura 4. La fase nemática (NM) se caracteriza por presentar orden orientacional de largo alcance y por la ausencia de orden posicional de corto alcance. Por su parte, tanto la fase tetragonal líquida (TL), que presenta franjas de espines alternadas que se intersectan perpendicularmente, como la paramagnética (PM) se caracterizan por la ausencia de orden orientacional y posicional. En el rango de temperaturas del diagrama la fase PM no se muestra ya que esta aparece a altas temperaturas.

4.2. Parámetro de orden de Booth

Debido a que todas las fases presentes en el diagrama de fase descrito en la sección anterior presentan magnetización nula, es necesario definir un parámetro de orden que sea sensible al orden orientacional de los espines. El parámetro de orden definido por Booth [13]

$$O_{hv} = \frac{n_v - n_h}{n_v + n_h}, \quad (28)$$

con n_v y n_h es el número de espines vecinos antiparalelos, ubicados en posición relativa vertical u horizontal, respectivamente, en la red (esto es, ubicados arriba-abajo o a los costados en los sitios de la red). El parámetro definido de esta forma resulta nulo para las fases PM y TL, y toma los valores $O_{hv} = +1(-1)$ para los ordenamientos en fajas verticales (horizontales).

4.3. Modelado de películas multicapa

El sistema bicapa magnética estudiado en este trabajo se modeló como dos redes cuadradas discretas, de igual parámetro de red y tamaño, ubicadas en forma concéntrica una sobre la otra. La figura 6 muestra un esquema del modelo.

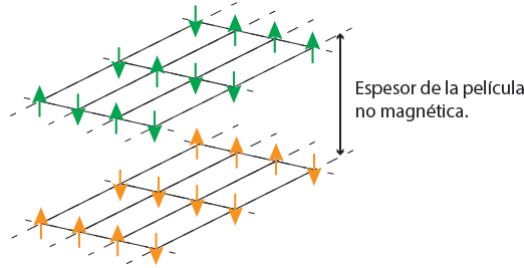


Figura 6: *Esquema del sistema bicapa.*

Al Hamiltoniano de Ising con interacciones de intercambio y dipolares en cada capa se sumó un término de interacción entre capas. Dicha interacción se considera entre espines ubicados en la misma posición de la red en sus respectivas capas. Como se explico en la sección 2.3.1, la misma puede ser ferromagnética o antiferromagnética, dependiendo del espesor de la capa no magnética. Para el sistema estudiado en este trabajo nos restringimos a

interacciones ferromagnéticas. En relación a las interacciones dipolares entre capas, si bien el campo disperso es nulo para películas uniformemente magnetizadas, esta condición no se cumple totalmente en las fases que presentan dominios tipo franjas. Sin embargo, dado que el ancho de las franjas con las que se trabajará es pequeño, se considero que la magnetización es aproximadamente uniforme, de manera que no serán incluidas.

El hamiltoniano del sistema es

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + g_1 \sum_{i,j} \frac{S_i S_j}{r_{i,j}^3} + g_2 \sum_{i,j} \frac{\sigma_i \sigma_j}{r_{i,j}^3} - J_3 \sum_i S_i \sigma_i, \quad (29)$$

donde S_i , σ_i son las variables de espín de cada capa. $J_{1,2} > 0$ son las constantes de intercambio correspondientes a las interacciones ferromagnéticas entre espines, a primeros vecinos, dentro de una misma capa; mientras que $g_{1,2} > 0$ son constantes asociadas a las interacciones dipolares también dentro de una misma capa. El último término corresponde a la interacción ferromagnética ($J_3 > 0$) entre espines primeros vecinos entre capas.

5. Metodología

5.1. El método Monte Carlo

El objetivo principal de una simulación Monte Carlo es recrear la evolución de un sistema, simulando las fluctuaciones térmicas de un estado del sistema a otro, como si se tratara de un experimento donde, en el transcurso del tiempo, el sistema intercambia energía con un baño térmico. Con dicha simulación se busca poder calcular el valor esperado de un observable Q , que para un sistema en el ensamble canónico esta dado por

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \quad (30)$$

Típicamente en mecánica estadística los sistemas poseen un gran numero de partículas, por lo que calcular directamente dicho valor es problemático. Sin embargo, en el equilibrio el sistema permanece la mayoría del tiempo en unos pocos estados, es decir, no necesariamente todos los estados disponibles son alcanzados. Cada estado con una dada energía, a un dado tiempo, tiene una determinada probabilidad o peso. Por tanto, no todos los términos de la sumatoria contribuyen igual, por ejemplo, un sistema a bajas temperaturas se encontrara la mayor parte del tiempo en el estado fundamental. Esto permite pensar una técnica para estimar el valor de $\langle Q \rangle$ a partir de un subconjunto de estados tomados con una dada probabilidad a partir de una distribución p_{μ} . Esta forma de selección de estados se llama muestreo de importancia.

Suponiendo que se toman N_i estados de dicha distribución, la cantidad

$$Q_{N_i} = \frac{\sum_{i=1}^{N_i} Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^{N_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}, \quad (31)$$

donde $\beta = 1/k_B T$, nos da la mejor estimación del valor de $\langle Q \rangle$ y para $N_i \rightarrow \infty$ es $Q_{N_i} = \langle Q \rangle$.

Los estados de un sistema en equilibrio siguen una distribución de Boltzmann, se puede tomar entonces $p_{\mu} = Z^{-1} e^{-\beta E_{\mu}}$, simplificando la ecuación en la expresión

$$Q_{N_i} = \frac{\sum_{i=1}^{N_i} Q_{\mu_i}}{N_i} \quad (32)$$

El problema radica entonces en hallar dichos estados. Una forma de hacerlo es seguir una secuencia de estados que conformen una cadena de Markov,

de manera que la simulación vaya recorriendo estados hasta alcanzar alguno de esos estados de equilibrio. El proceso de Markov se elige de manera que se garantice que, partiendo de un estado cualquiera, luego de un tiempo se genere una sucesión de estados con probabilidad dada por la distribución de Boltzmann.

En un proceso de Markov la probabilidad $P(\mu \rightarrow \nu)$ de generar un estado ν a partir de otro μ debe ser constante en el tiempo y depender solamente de las propiedades de dichos estados y no de otros previos o posteriores. Es decir, la probabilidad de generar un estado ν a partir de otro estado μ es la misma independientemente del recorrido del proceso. Además, para garantizar que los estados alcanzados tengan una probabilidad dada por la distribución de Boltzmann, se imponen dos condiciones:

- Todos los estados del sistema deben poder ser alcanzados luego de un número finito de pasos, independientemente del estado de partida. Debe haber al menos un camino con probabilidades de transición distintas de cero, para llegar desde un estado cualquiera a otro. Esto se llama condición de ergodicidad.

- Por otro lado se impone la condición de balance detallado, que es la que asegura que efectivamente la distribución de probabilidad generada sea la de Boltzmann. Puesto que en un sistema en equilibrio las tasas de transición desde y hacia un estado μ cumplen

$$\sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) = \sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) \quad (33)$$

la condición de balance detallado es

$$p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) = p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) \quad (34)$$

Luego, ya que la distribución buscada es de Boltzmann, tomamos las probabilidades de manera que

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} \quad (35)$$

Otro punto importante en una simulación es la forma en que el sistema avanza de un estado a otro. Debe establecerse una regla de aceptación que permita o no pasar de un dado estado a otro, barriendo un amplio rango de estados posibles, y debe hacerse de manera que el sistema se mueva hacia estados de equilibrio de manera eficaz, es decir, que no implique grandes tiempos de cálculo. Uno de estos métodos es el algoritmo de Metrópolis.

5.2. El algoritmo de Metrópolis

El algoritmo permite definir si el sistema se mueve de un estado a otro. El mismo, a partir de un estado μ , asigna a cada posible nuevo estado ν una probabilidad $g(\mu \rightarrow \nu)$ y luego evalúa si dicho estado es aceptado o rechazado con una cierta probabilidad de aceptación $A(\mu \rightarrow \nu)$. Se debe cumplir que

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu), \quad (36)$$

para cumplir con las condiciones de ergodicidad y balance detallado. $g(\mu \rightarrow \nu)$ es la probabilidad de selección y da la probabilidad de que, dado un estado μ el algoritmo genere un estado ν .

En el algoritmo de Metropolis la probabilidad de selección, $g(\mu \rightarrow \nu)$, toma el mismo valor para cada uno de los estados posibles ν . De esta manera, si desde el estado μ hubiera N_e estados accesibles ν , sería $g(\mu \rightarrow \nu) = 1/N_e$.

Se toma la probabilidad de aceptación según

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{si } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (37)$$

Esta definición implica que siempre que el nuevo estado ν tenga energía menor que el estado previo μ , se acepta. Caso contrario existe una cierta probabilidad de transición dada por una exponencial decreciente.

En particular, para un sistema tipo Ising como el estudiado en este trabajo, el algoritmo se ejecuta de la siguiente manera:

1. Se elige aleatoriamente un espín (s) a partir de una distribución uniforme normalizada.
2. Se calculan las energías para el estado actual del sistema, $E_\mu(s)$, y $E_\nu(-s)$, es decir, la energía que tendría el sistema si el espín s se invirtiera.
3. Si $\Delta E = E_\nu - E_\mu < 0$ se acepta el cambio en s .
4. Si $\Delta E > 0$ se compara un número aleatorio p , distribuido uniformemente, con la función $A(\Delta E, T) = e^{\Delta E/k_B T}$. Si $p < A(\Delta E, T)$ se acepta el cambio en el espín s , caso contrario queda inalterado.

Por definición, la unidad de tiempo o paso Monte Carlo (PMC) corresponde a repetir este algoritmo N veces, donde N es el número de espines.

En muchos casos interesa estudiar el comportamiento del sistema a medida que varía la temperatura. El algoritmo de Metrópolis es efectivo para hacer que el sistema evolucione a altas temperaturas, ya que la tasa de aceptación $A(\Delta E, T)$ toma valores cercanos a 1. Sin embargo, a bajas temperaturas el sistema evolucionará más lentamente de un estado a otro. Una

de las alternativas para realizar simulaciones de manera mas conveniente a bajas temperaturas es utilizar una dinámica de baño térmico. Este algoritmo es similar al de Metrópolis, pero la tasa de aceptación se define como $A(\Delta E, T) = \frac{e^{\Delta E/k_B T}}{1+e^{\Delta E/k_B T}}$. De esta forma, a bajas temperaturas se da una probabilidad mayor de aceptación, comparada con la de Metrópolis, y permite a la simulación recorrer distintos estados con mayor eficiencia.

En nuestro sistema utilizamos el algoritmo de baño térmico por ser más conveniente en el régimen de bajas temperaturas.

5.3. Dinámica de tiempos cortos

Para el estudio de sistemas mediante simulaciones, en especial los estudios sobre transiciones de fase, el equilibrio termodinámico se alcanza permitiendo que el sistema evolucione hasta tiempos muy largos antes de realizar las mediciones, de modo que los observables alcancen valores estacionarios.

Sin embargo, en años recientes se han desarrollado técnicas que se centran en el estudio del comportamiento dinámico del sistema en los primeros pasos de su evolución hacia el equilibrio. Una de estas técnicas es la dinámica de tiempos cortos (short-time dynamics, STD) [23]. La STD provee una herramienta para caracterizar transiciones de fase, ya que permite distinguir entre transiciones de fase de primer orden, continuas o topológicas de tipo Kosterlitz-Thouless (KT), entre otras. Además permite obtener, cuando corresponda, los exponentes críticos, del sistema.

Esto se realiza mediante un análisis de las series temporales que caracterizan la evolución fuera de equilibrio de los observables de interés a distintas temperaturas, partiendo de los puntos fijos triviales del sistema (los estados fundamental y $(T \rightarrow \infty)$). Aquí radica una de sus principales ventajas, ya que no se requiere que el sistema modelado alcance el equilibrio, por lo tanto los tiempos de simulación se reducen notablemente.

En el caso de transiciones continuas, si el sistema se encuentra en el punto crítico, luego de un tiempo de unos pocos pasos Monte Carlo, los observables siguen leyes de potencia dependientes del tiempo (t), cuyos exponentes dinámicos están relacionados con los exponentes críticos del modelo en equilibrio y con el exponente dinámico z de la longitud de correlación temporal $\xi(t) \propto t^{1/z}$. En el caso de transiciones de primer orden un comportamiento pseudocrítico se obtiene en los puntos espinodales [23].

5.3.1. Evolución desde un estado inicial desordenado

Para explicar como pueden obtenerse las leyes de potencia, los exponentes dinámicos y críticos, consideramos un sistema ferromagnético sin campo externo, cerca del punto crítico, en contacto con un baño térmico a temperatura T . Durante la evolución dinámica desde un estado inicial desordenado ($T \rightarrow \infty$) con magnetización inicial $m_0 \ll 1$, los momentos del parámetro de orden, $M^{(k)}(t)$, verifican la siguiente relación escala:

$$M^{(k)}(t) = \langle M^{(k)}(t) \rangle \sim b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\epsilon, L/b, b^{x_0}m_0), \quad (38)$$

donde L es el tamaño del sistema; β y ν son los exponentes críticos definidos en equilibrio del parámetro de orden y la longitud de correlación espacial, respectivamente (ver sección 3.3); x_0 un exponente asociado con la dependencia de los momentos respecto de m_0 ; $\epsilon = \frac{T-T_c}{T_c}$ es la temperatura reducida; y b es un parámetro de escala. El valor medio $\langle \dots \rangle$ se toma sobre varias realizaciones, con igual valor del parámetro de orden [23]. Esta ley de escala es válida cuando la longitud de correlación temporal, $\xi(t)$, supera el parámetro de red pero es pequeña comparada con el tamaño del sistema o con la longitud de correlación del sistema en equilibrio $\xi(T)$.

Una simulación que comience cerca del punto crítico, inicialmente tendrá correlaciones espaciales despreciables, luego del tiempo t_{mic} las correlaciones comienzan a ser apreciables llegando a ser comparables al tamaño del sistema a un tiempo t_{mac} . Es el último límite el responsable de que la STD sea prácticamente no afectada por efectos de tamaño finito.

Tomando $b = t^{1/z}$ y considerando que se cumple $\xi(t) \propto t^{1/z} \ll L$, la ecuación (38) puede escribirse como:

$$M^{(1)}(t) = t^{-\beta/z\nu} M^{(1)}(1, t^{1/z\nu}\epsilon, Lt^{-1/z}, t^{x_0/z}m_0) = t^{-\beta/z\nu} F(t^{x_0/z}m_0), \quad (39)$$

donde la última igualdad corresponde al punto crítico, $\epsilon = 0$. La función de escala $F(x)$ debe satisfacer $F(x) \sim x$ para $x \ll 1$ y $F(x) = cte.$ para $x \gg 1$. Se obtienen entonces las siguientes leyes de escala:

$$M(t) \sim t^{x_0/z - \beta/z\nu} \quad \text{si } m_0 t^{x_0/z} \ll 1 \quad (40)$$

$$M(t) \sim t^{-\beta/z\nu} \quad \text{si } m_0 t^{x_0/z} \gg 1 \quad (41)$$

Cuando $T \sim T_c$, la modulación introducida por la función de escala $F(t^{1/z\nu}\epsilon)$ permite distinguir cuando el sistema se encuentra a la temperatura crítica. Un comportamiento similar se obtiene para otros observables, como por ejemplo la susceptibilidad.

5.3.2. Evolución desde el estado fundamental

Si la evolución del sistema, a una temperatura cercana a la crítica, comienza desde un estado inicial ordenado ($m_0 = 1$), considerando el estado ordenado como el correspondiente a $T = 0$ sin campo externo, los momentos del parámetro de orden obedecen:

$$M^{(k)}(t) = \langle M^{(k)}(t) \rangle = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\epsilon, L/b). \quad (42)$$

Para $L \rightarrow \infty$, tomando nuevamente $b = t^{1/z}$, la ley de escala resulta:

$$M(t) = t^{-\beta/\nu z} F(t^{1/z\nu}\epsilon) \quad (43)$$

A $T = T_c$ ($\epsilon = 0$) la expresión se reduce a:

$$M(t) \propto t^{-\beta/\nu z} \quad (44)$$

Nuevamente, estas expresiones permiten obtener la temperatura crítica observando el comportamiento de $M(t)$ a distintas temperaturas. Cuando el sistema se encuentre exactamente en la T_c el comportamiento es la ley de potencias de la ecuación (44), mientras que a temperaturas cercanas pero distintas a la crítica se observarán desviaciones debidas a la función de escala $F(t^{1/z\nu}\epsilon)$.

Desde el punto de vista práctico, una simulación Monte Carlo, que emplee la STD como herramienta de estudio de transiciones de fase, implica fijar los parámetros de control (en este caso T) en valores que podrían ser los correspondientes a los puntos de transición. Si para estos valores se halla que los observables siguen leyes de potencia, entonces estos corresponden a los de la transición. En el caso de transiciones continuas, las leyes de potencia se obtienen para los mismos valores de los parámetros desde ambas condiciones iniciales, y es posible estimar los exponentes críticos a partir de los exponentes dinámicos de la STD. Si la transición es de primer orden los valores de los parámetros no coinciden, y pueden asociarse con los puntos espinodales, en los que se espera un comportamiento pseudocrítico determinado por correlaciones divergentes.

5.3.3. Aplicación al modelo de Ising con interacciones dipolares

En este trabajo los observables son el parámetro de orden orientacional, $O_{hv} = \langle O_{hv} \rangle$, y sus momentos. Se definen la susceptibilidad isotérmica a campo nulo (χ) y el cumulante de Binder de segundo orden (U) como

$$\chi = \frac{L^2}{T} (\langle O_{hv}^2 \rangle - \langle O_{hv} \rangle^2) \quad (45)$$

$$U = 1 - \frac{\langle O_{hv}^2 \rangle}{\langle O_{hv} \rangle^2} \quad (46)$$

Los puntos fijos del sistema corresponden a los puntos fijos triviales $T = \infty$ y $T = 0$, para los cuales el sistema se encuentra en las fases PM y de franjas h_n , respectivamente. Para el sistema partiendo desde el estado ordenado correspondiente a la configuración de franjas (estado fundamental), la evolución temporal para O_{hv} y sus momentos a la temperatura de transición, se propone como [1, 11]

$$O_{hv}(t) \propto t^{-\beta/\nu z} \quad (47)$$

$$\chi(t) \propto t^{\gamma/\nu z} \quad (48)$$

$$U(t) \propto t^{d/z}, \quad (49)$$

donde d es la dimensión del sistema, en este caso $d = 2$ y γ es el exponente de la susceptibilidad definido en la sección 3.3.

Mientras que para el sistema partiendo del estado correspondiente a la fase PM se propone

$$O_{hv}^2(t) \propto \chi(t) \propto t^{\gamma/\nu z} \quad (50)$$

5.4. Condiciones de contorno

Debido a que las interacciones dipolares son de largo alcance, los efectos de tamaño finito del sistema son significativos. Para considerar estos efectos se implementaron condiciones de contorno periódicas de acuerdo al método de las sumas de Ewald. El mismo consiste en colocar réplicas del sistema en

todas las direcciones y evaluar las contribuciones de la energía dipolar entre la red original y las réplicas.

La energía dipolar se calcula entonces como una sumatoria de las interacciones entre espines de la red original y las réplicas. Estas sumas se desarrollan en series que convergen rápidamente y se pueden truncar sin introducir errores significativos. Esto se hace descomponiendo la energía dipolar en dos términos, uno de corto alcance que decae exponencialmente y cuyas contribuciones a la energía involucran a las primeras dos réplicas en torno a la red original y los espines de los bordes de esta última; y otro término que decae más lentamente pero puede truncarse a un orden finito [3].

5.5. Análisis de los tiempos de relajación fuera del equilibrio

Otra técnica que se basa en el comportamiento fuera de equilibrio es el análisis de los tiempos de relajación, conocida como NER (Nonequilibrium relaxation) [24]. Para un sistema ferromagnético cerca del punto crítico se espera que la magnetización en función del tiempo (t), para una configuración inicial correspondiente al estado fundamental, se comporte como

$$m(t, T) = \begin{cases} e^{-t/\tau}, & T > T_c \\ t^{-\frac{\beta}{\nu z}}, & T = T_c \\ m_{eq}, & T < T_c \end{cases} \quad (51)$$

donde m_{eq} es la magnetización espontánea en la fase ferromagnética, τ es el tiempo de relajación (que depende de la temperatura) y λ un exponente dinámico.

La temperatura crítica puede estimarse determinando $m(t, T)$ para varias temperaturas, tales que $T > T_c$, en un intervalo de tiempo suficiente, usando la relación de escala:

$$m(t, T) = \tau^{-\lambda} Y(t/\tau), \quad (52)$$

obteniéndose la función de escala:

$$Y(t/\tau(T_i)) = \tau^\lambda(T_i) m(t, T_i), \quad (53)$$

para la cual todas las curvas colapsan, es posible determinar entonces el tiempo de relajación $\tau(T)$ para cada temperatura y valor de λ . Se han propuesto diferentes dependencias para distintos tipos de transiciones de fase relacionadas con la forma en que diverge la longitud de correlación. Este

análisis da una herramienta más para determinar el tipo de transición, buscando la dependencia que mejor se ajuste en un gráfico $\tau(T)$ versus T [24]. En particular, para transiciones de fase continuas:

$$\tau(T) = a|T - T_c|^{-b}. \quad (54)$$

6. Resultados y discusión

Se realizaron simulaciones Monte Carlo, con el algoritmo de baño térmico en redes cuadradas de tamaño $L = 64$ y 128 , a campo externo nulo. Se consideraron los siguientes valores de los parámetros de cada capa y entre capas:

J_1	J_2	g_1	g_2	J_3
1	1	1	1	0,5
1,5	1,5	1	1	0,5
1	1,5	1	1	0,5
1	1,5	1	1	1,25

Tabla 1: *Valores de las constantes de intercambio y dipolares estudiadas.*

Cada caso se compara con las observaciones del modelo en una monocapa, es decir el sistema sin acoplamiento. Por este motivo, se resumen y exponen los principales resultados.

6.1. Caso no acoplado

En el caso no acoplado ($J_3 = 0$) y a bajas temperaturas ambas capas presentan configuraciones de dominios tipo franjas de ancho h_1 y h_2 en las capas 1 y 2 según sean los valores de J_1 y J_2 . La figura 7 muestra las configuraciones de equilibrio ($t = 5 \times 10^6 PMC$) para los casos $J = 1$ y $J = 1,5$, correspondientes a las temperaturas indicadas en las leyendas respectivas. Al aumentar la temperatura ambos casos se desordenan hacia la fase TL. Dicha transición es continua y ocurre a distintas temperaturas para cada caso, siendo menor la correspondiente a $J = 1$.

Para las capas 1 y 2 las temperaturas de transición son $T = 0,395(1)$ y $T = 0,572(1)$, respectivamente, como se muestra en la figura 5 [1]. La tabla 2 indica los valores de los exponentes dinámicos correspondientes a las dos condiciones iniciales.

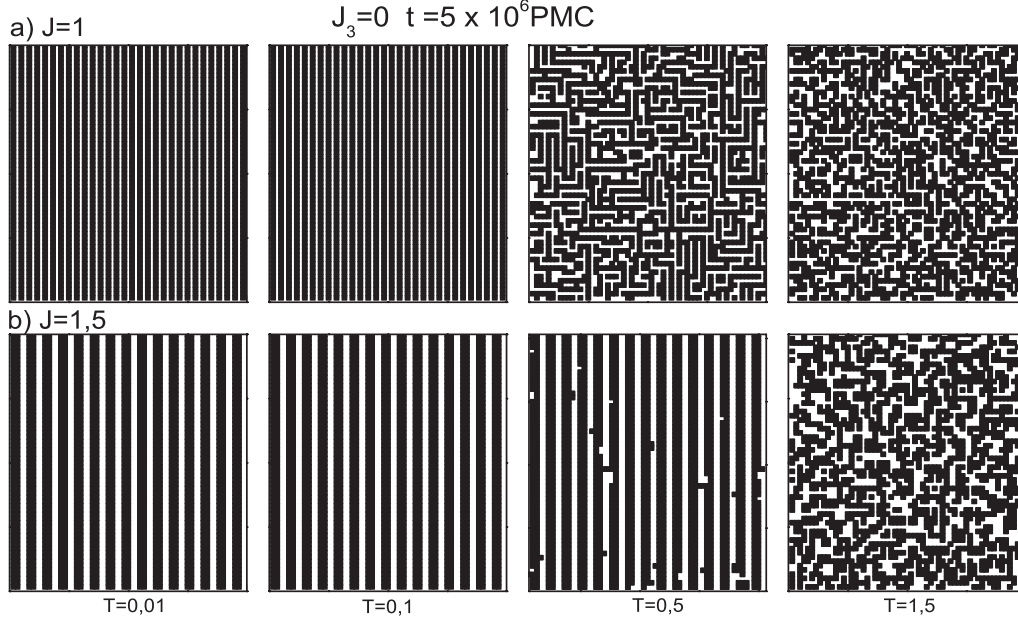


Figura 7: Configuración de equilibrio ($t = 5 \times 10^6$ PMC) para un sistema de tamaño $L = 64$, a las temperaturas indicadas, para el caso desacoplado $J_3 = 0$. En a) se muestra el caso $J = 1$ mientras que b) corresponde al caso $J = 1,5$.

J	$\beta/\nu z$ (O)	$\gamma/\nu z$ (O)	$2/z$ (O)	$\gamma/\nu z$ (D)	T_t (O)	T_t (D)
1	0,0804(5)	0,740(8)	0,903(8)	0,747(5)	0,395(1)	0,396(2)
1,5	0,0386(6)	0,599(5)	0,680(8)	0,593(6)	0,5730(5)	0,572(1)

Tabla 2: Exponentes dinámicos obtenidos para el sistema partiendo desde el estado ordenado (O) y desordenado (D). En las últimas dos columnas se resumen las temperaturas T_t en las cuales se encontró el comportamiento tipo ley de potencias para cada condición inicial y J .

6.2. Caso $J_1 = J_2 = 1, J_3 = 0,5$

Para los valores de los parámetros $J_1 = J_2 = 1$, cuando se impone una interacción débil entre capas ($J_3 = 0,5$) se observa que las mismas se acoplan ferromagnéticamente, mostrando la misma estructura de dominios tipo franjas de ancho h_1 a bajas temperaturas, tal como muestra la figura 8. La

configuración de equilibrio a $T = 0,01$ fue considerada como el estado fundamental, este coincide con el de la monocapa. Al aumentar la temperatura se observa una única transición en ambas capas hacia la fase TL .

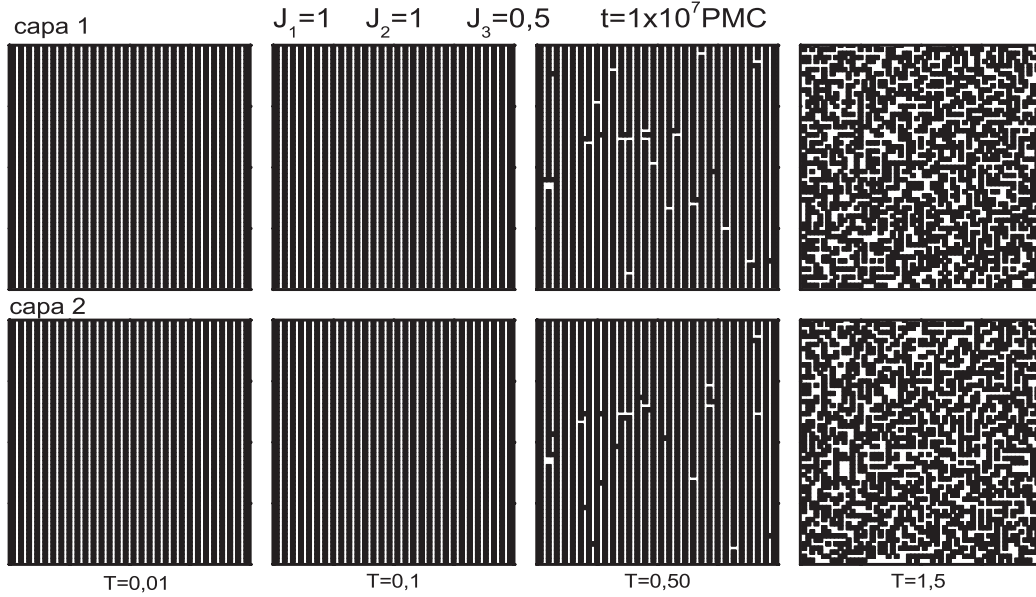


Figura 8: Configuraciones de equilibrio de un sistema con $L = 64$ ($t = 1 \times 10^7$ PMC), a las temperaturas indicadas, para el caso $J_1 = J_2 = 1$, $J_3 = 0,5$. La fila superior corresponde a la capa 1 mientras que la inferior a la capa 2.

Con el fin de caracterizar la transición de fase exhibida en las snapshots mediante la STD, se realizaron simulaciones hasta 5041 PMC para un sistema de tamaño $L = 128$. Se obtuvieron curvas de la evolución de los observables, definidos en la sección 5.3.3 en un amplio intervalo de temperaturas, buscando aquellas curvas que exhibían un comportamiento similar a leyes de potencia.

Los gráficos principales de la figura 9 muestran la evolución del O_{hv} para ambas capas, cuando el sistema parte de la configuración correspondiente al estado fundamental (franjas de ancho h_1). Los insets de las mismas muestran la evolución de la susceptibilidad de las capas respectivas en el intervalo indicado. Se realizaron ajustes de acuerdo con las ecuaciones (47) y (48). El mejor comportamiento de ley de potencias se obtuvo para $T_t = 0,6825(25)$ para ambas capas, donde el error se estimó a partir de las temperaturas para las cuales se comienzan a observar apartamientos de la ley de potencia.

Cuando el sistema se inicia desde la configuración correspondiente a la fase

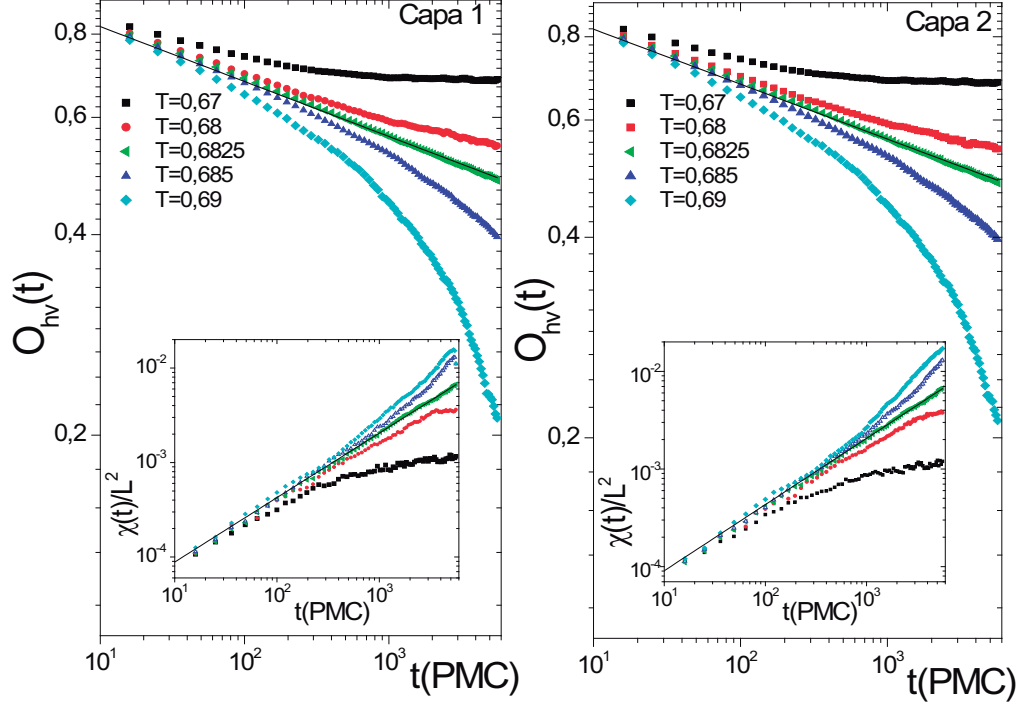


Figura 9: Gráficos en escala log-log de la evolución del parámetro de orden $O_{hv}(t)$, para el caso $J_1 = J_2 = 1$, $J_3 = 0,5$, a las temperaturas indicadas en las leyendas. En los insets se muestran las susceptibilidades $\chi(t)$ para cada capa correspondientes a las temperaturas indicadas. Las líneas sólidas, en todos los gráficos, corresponden a los ajustes de una ley de potencia.

PM, el mejor comportamiento de ley de potencia de la evolución temporal de $O_{hv}^2(t)$ se obtuvo para $T_t = 0,685(5)$ en ambas capas. Los gráficos de la figura 10 muestran la evolución dinámica de este observable en ambas capas a distintas temperaturas. Se observan los comportamiento tipo ley de potencia, y las desviaciones hacia abajo y hacia arriba esperadas desde las funciones de escala correspondientes a temperaturas mayores y menores a la temperatura de transición, respectivamente.

Los exponentes obtenidos en los ajustes de ley de potencia de los observables, para el sistema partiendo desde el estado ordenado (ecuaciones (47), (48)), (49) y desordenado (ecuación (50)), se resumen en la tabla 3. Comparando entre capas, puede observarse que los valores obtenidos de los

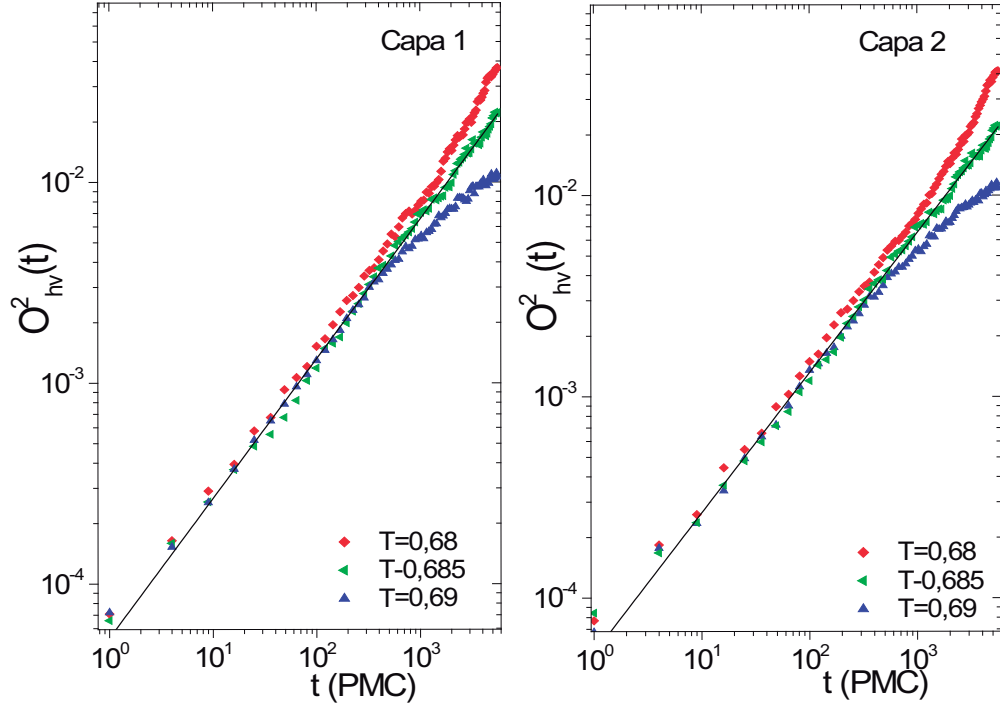


Figura 10: Gráficos *log-log* de la evolución de $O_{hv}^2(t)$, para el caso $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 0,5$, a distintas temperaturas. En líneas solidas se muestran los ajustes de ley de potencia.

exponentes son coincidentes dentro del error. Por otra parte, en la tabla se comprueba que el exponente $\gamma/(\nu z)$ medido desde las evoluciones iniciadas con las configuraciones ordenada y desordenada, tienen buen acuerdo dentro del error. Este resultado, junto con la igualdad de las temperaturas T_t (O) y T_t (D), indica que ambas capas experimentan una transición de fase continua.

El análisis del cumulante de Binder de segundo orden $U(t)$, mostrado en la figura 11 permitió obtener el valor de $z = 2,36(2)$ y $z = 2,35(2)$ para las capas 1 y 2 respectivamente. Este valor es ligeramente superior al valor estimado para el modelo de Ising con interacciones de corto alcance, $z = 2,17$.

Los resultados indican que el acoplamiento produce un corrimiento en la T_c de la transición, respecto a las monocapas, manteniendo el carácter continuo de la transición con exponentes similares, ver tablas 2 y 3.

Por otra parte, el análisis de la relajación del O_{hv} fuera de equilibrio

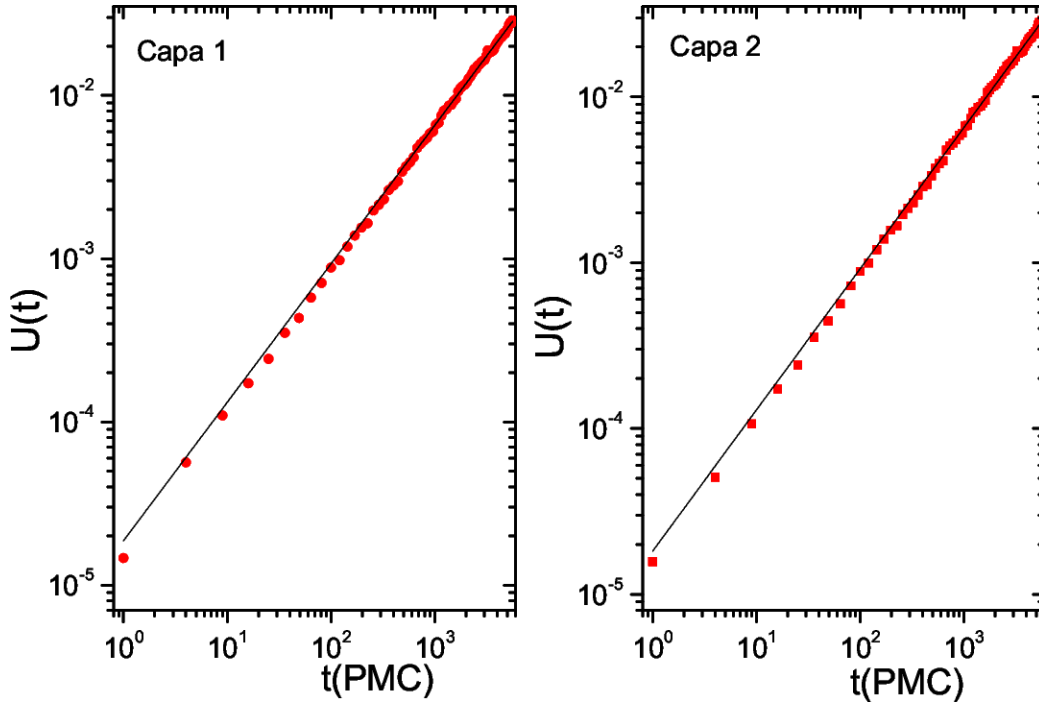


Figura 11: *Cumulante de Binder de segundo orden para el caso $J_1 = J_2 = 1$, $J_3 = 0,5$*

Capa	$\beta/\nu z$ (O)	$\gamma/\nu z$ (O)	$2/z$ (O)	$\gamma/\nu z$ (D)	T_t (O)	T_t (D)
1	0,0824(6)	0,682(4)	0,848(6)	0,695(10)	0,6825(25)	0,685(5)
2	0,0824(6)	0,678(5)	0,851(6)	0,695(9)	0,6825(25)	0,685(5)

Tabla 3: *Exponentes dinámicos obtenidos para el sistema partiendo desde el estado ordenado (O) y desordenado (D). En las últimas dos columnas se resumen las temperaturas T_t en las cuales se encontró el comportamiento tipo ley de potencias para cada condición inicial*

propuesto por la ecuación (53) y mostrado en el panel principal de la figura 12 permitió determinar el tiempo de relajación en función de la temperatura, $\tau(T)$. Este, confirma que la transición es continua, ya que la dependencia de los puntos $\tau(T)$ es acorde con la curva dada por la ecuación (54) (ver inset). Con este análisis las temperaturas de transición estimadas fueron $T_c = 0,678(9)$ y $T_c = 0,684(8)$ para las capas 1 y 2 respectivamente, en acuerdo con los valores de T_t encontrados en el estudio previo, ver tabla 3.

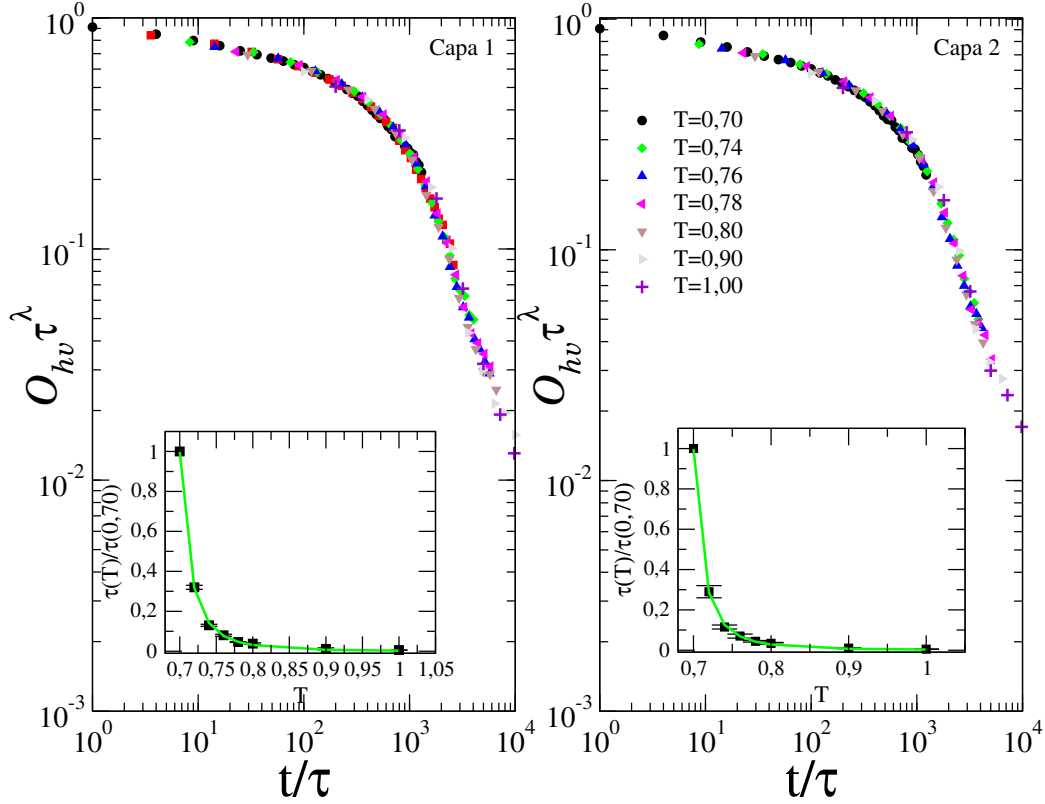


Figura 12: *Escaleo de la relajación fuera del equilibrio del O_{hv} desde el estado ordenado, para el caso $J_1 = J_2 = 1$ y $J_3 = 0,5$, de ambas capas. En inset se muestra el tiempo de relajación en función de la temperatura $\tau(T)$, la línea sólida*

6.3. Caso $J_1 = J_2 = 1,5$, $J_3 = 0,5$

Para los valores de los parámetros $J_1 = J_2 = 1,5$ y ($J_3 = 0,5$), a bajas temperaturas las capas se acoplan ferromagnéticamente, con estructuras de dominios tipo franjas de ancho h_2 en ambas capas (ver figura 13). De esta forma, el estado fundamental se corresponde con aquel de la monocapa. Al aumentar la temperatura se observa una única transición en ambas capas hacia la fase TL .

De manera similar al caso anterior, se realizaron simulaciones para el análisis de STD hasta 5041 PMC, con el fin de obtener curvas de la evolución dinámica de los observables.

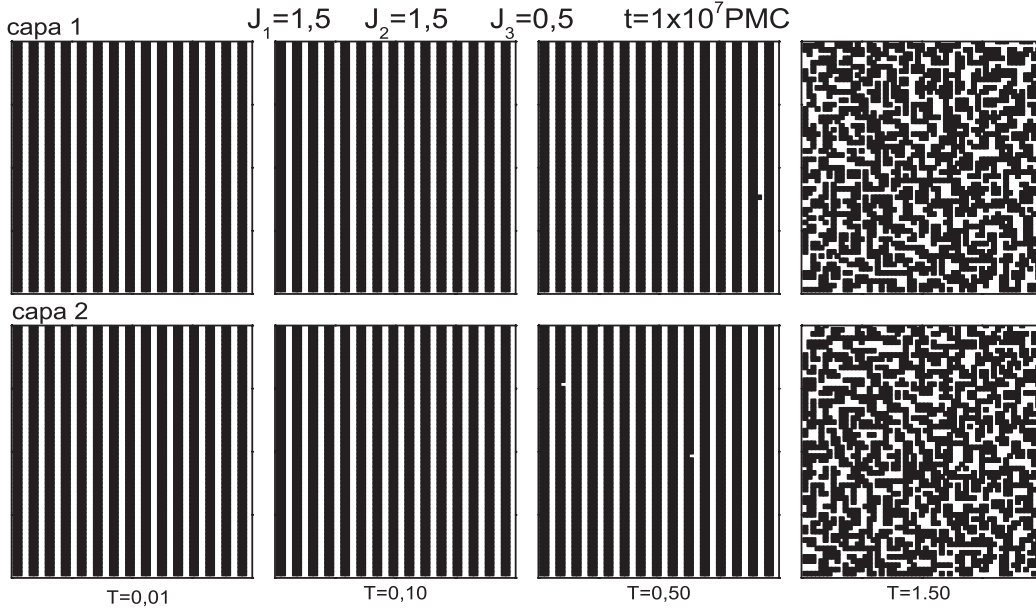


Figura 13: Configuraciones de equilibrio ($t = 1 \times 10^7$ PMC), a las temperaturas indicadas, para el caso $J_1 = J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$. La fila superior corresponde a la capa 1 mientras que la inferior a la capa 2.

En la figura 14 se muestra la evolución del $O_{hv}(t)$ para ambas capas, cuando el sistema se inicia desde la configuración de franjas de ancho h_2 , en el intervalo de temperaturas indicado. Los insets de la misma figura corresponden a la evolución de la susceptibilidad de las capas respectivas. En ambas capas el mejor comportamiento de ley de potencias se obtuvo para $T_t = 0,9185(5)$.

Los gráficos de la figura 15 muestran las evoluciones dinámicas de $O_{hv}^2(t)$, desde la fase PM, en ambas capas, a las T indicadas. El mejor comportamiento de ley de potencia se obtuvo a $T_t = 0,918(2)$ para las dos capas, en buen acuerdo con el valor estimado desde la configuración ordenada.

Por otra parte, el análisis del cumulante de Binder $U(t)$ permitió obtener los valores de $z = 3,03(3)$ y $z = 2,98(4)$ para las capas 1 y 2, respectivamente. El gráfico y ajuste correspondiente se muestran en la figura 16.

En la tabla 4 se resumen los exponentes obtenidos mediante los ajustes de ley de potencia, para el sistema partiendo desde las configuraciones iniciales ordenada y desordenada. Los mismos coinciden dentro del error para ambas capas. En el caso de $\gamma/\nu z$, nuevamente resultan coincidentes para ambas

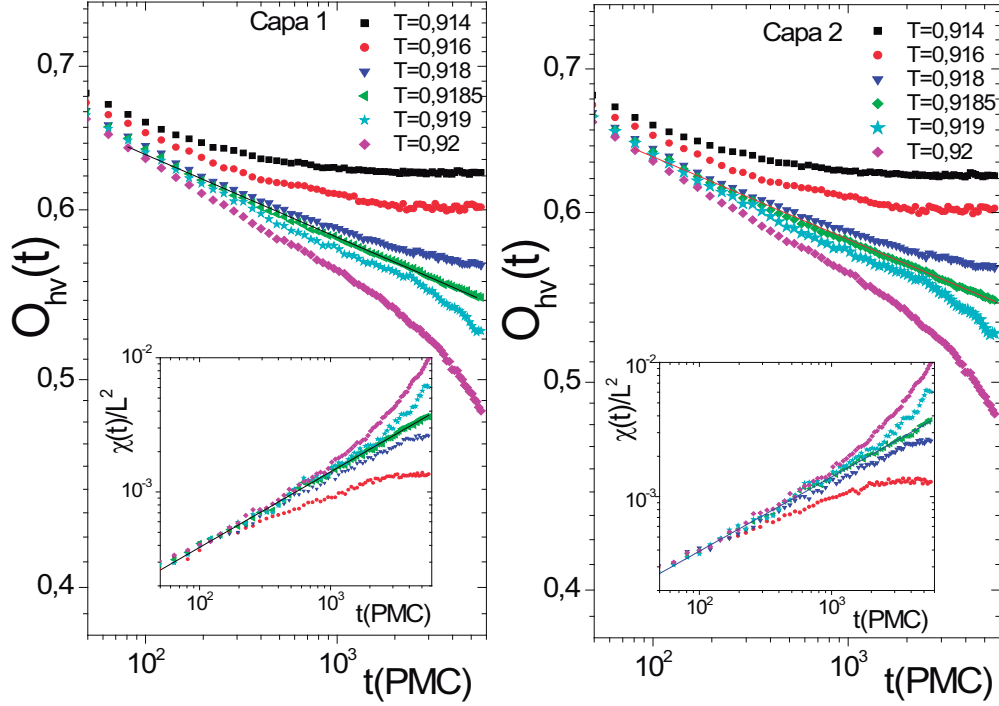


Figura 14: Gráficos log-log para la evolución del parámetro de orden $O_{hv}(t)$ correspondiente al caso con $J_1 = J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$, a las temperaturas indicadas. Los insets muestran las susceptibilidades $\chi(t)$ para cada capa a la temperatura indicada. Las líneas sólidas, en los gráficos e insets, corresponden a los ajustes de ley de potencia.

condiciones iniciales. Los resultados permiten establecer que la transición de fase es continua. Comparando los valores mostrados en la tabla 4 con los valores correspondientes a la monocapa con $J = 1,5$, ver tabla 2, se puede concluir que el acoplamiento produce un corrimiento en la temperatura de transición sin alterar el carácter de la misma.

Los resultados previos se confirmaron mediante el análisis de la relajación fuera del equilibrio. El comportamiento térmico del tiempo de relajación $\tau(T)$, mostrado en la figura 17, permitió obtener las temperaturas de transición, cuyos valores son $T_c = 0,9193(7)$ y $T_c = 0,9192(6)$ para la capa 1 y 2, respectivamente. A su vez, la dependencia de $\tau(T)$ indica que se trata de una transición continua, como puede verse a partir del ajuste con la ecuación

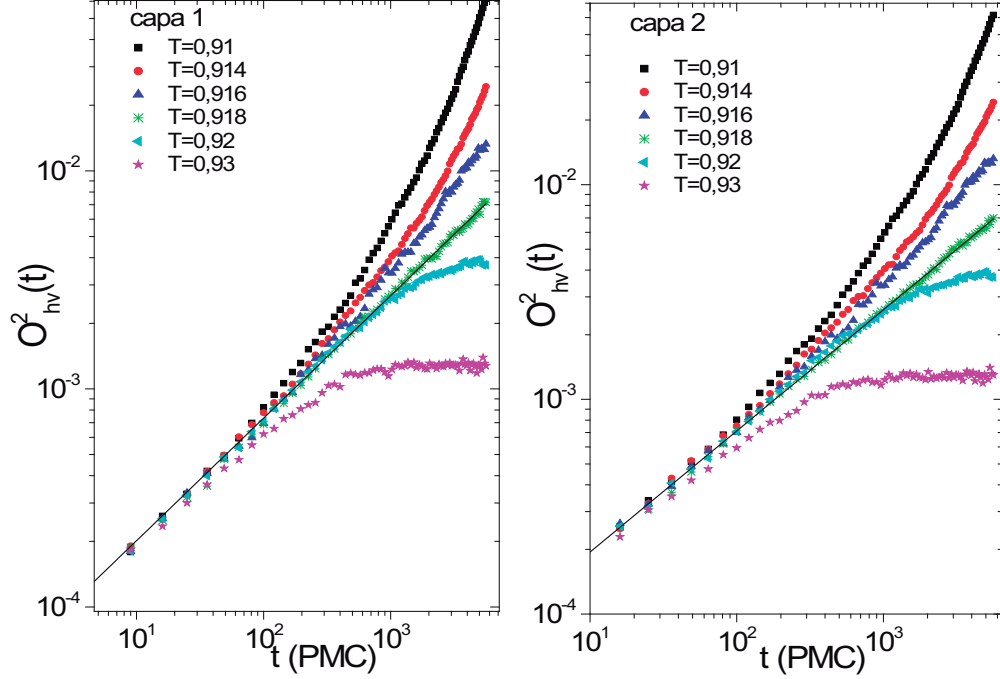


Figura 15: Gráficos log-log de la evolución de $O_{hv}^2(t)$, para el caso $J_1 = J_2 = 1,5$, $J_3 = 0,5$, a las temperaturas indicadas. En líneas sólidas se muestran los ajustes de ley de potencia.

(54) en los inset de la figura 17.

Capa	$\beta/\nu z$ (O)	$\gamma/\nu z$ (O)	$2/z$ (O)	$\gamma/\nu z$ (D)	T_t (O)	T_t (D)
1	0,0386(4)	0,561(4)	0,659(7)	0,562(6)	0,9185(5)	0,918(2)
2	0,0385(9)	0,558(6)	0,672(9)	0,564(5)	0,9185(5)	0,918(2)

Tabla 4: Exponentes dinámicos obtenidos para el sistema partiendo desde el estado ordenado (O) y desordenado (D) y temperaturas T_t a las cuales se encontró el comportamiento tipo ley de potencias para cada condición inicial.

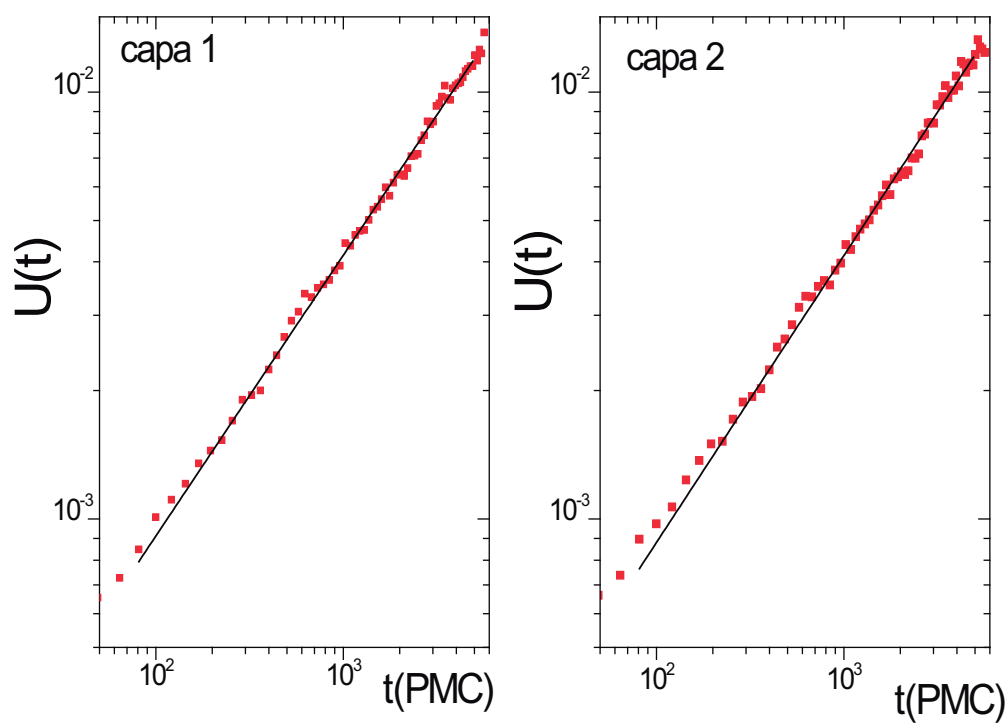


Figura 16: *Cumulante de Binder de segundo orden para el caso $J_1 = J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$. Las líneas sólidas indican los ajustes.*

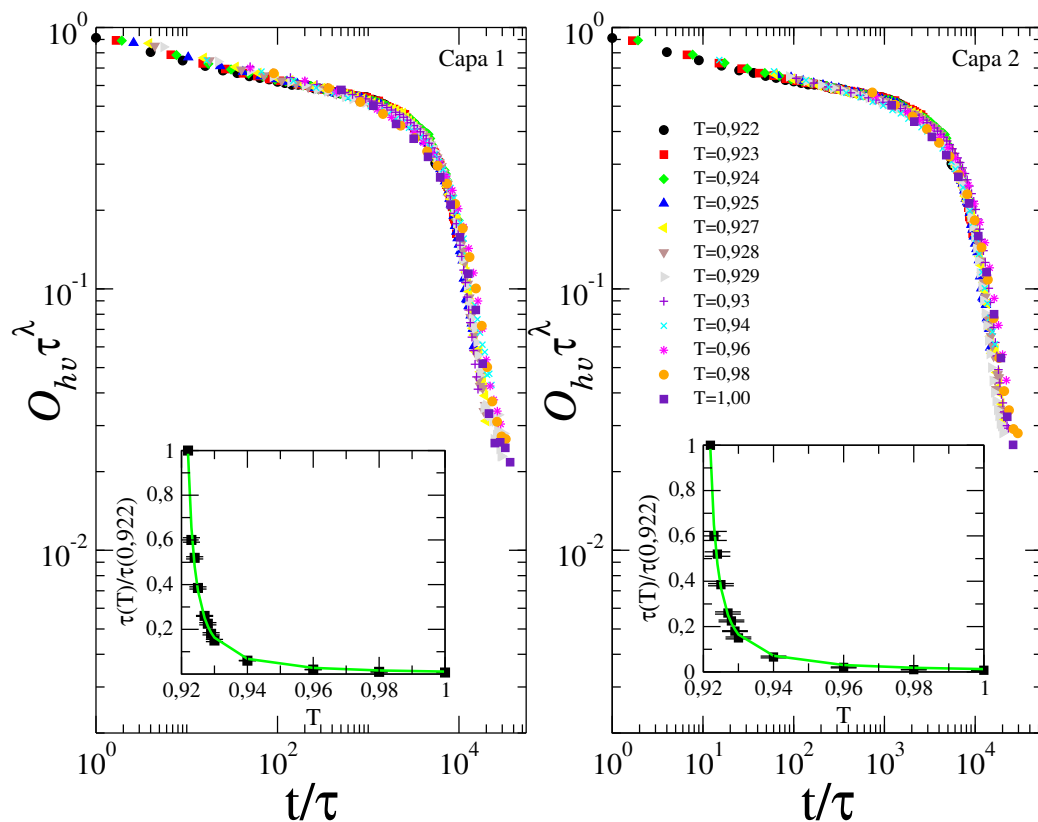


Figura 17: *Escaleo del tiempo de relajación fuera del equilibrio del O_{hv} desde el estado ordenado, para el caso $J_1 = J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$. El inset muestra el tiempo de relajación en función de la temperatura $\tau(T)$, la línea sólida corresponde al ajuste de la ec. (54).*

6.4. Caso $J_1 = 1, J_2 = 1,5$

6.4.1. Acoplamiento débil entre capas

En este caso se consideraron los siguientes valores de los parámetros: $J_1 = 1, J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$.

La figura 18 muestra las configuraciones del equilibrio en el rango $0,1 \leq T \leq 1,5$. Se observa un comportamiento similar a los casos anteriores, es decir, las capas se acoplan ferromagnéticamente a bajas temperaturas mostrando la misma estructura de franjas; excepto que, de acuerdo con las configuraciones en el equilibrio a $T = 0,01$, el estado fundamental corresponde a franjas de ancho h_2 para ambas capas. El mencionado estado fundamental es el mismo que el de la monocapa con el mayor valor de la constante de intercambio, $J = 1,5$. Al aumentar la temperatura ambas capas se desordenan hacia la fase TL , evidenciando una única transición.

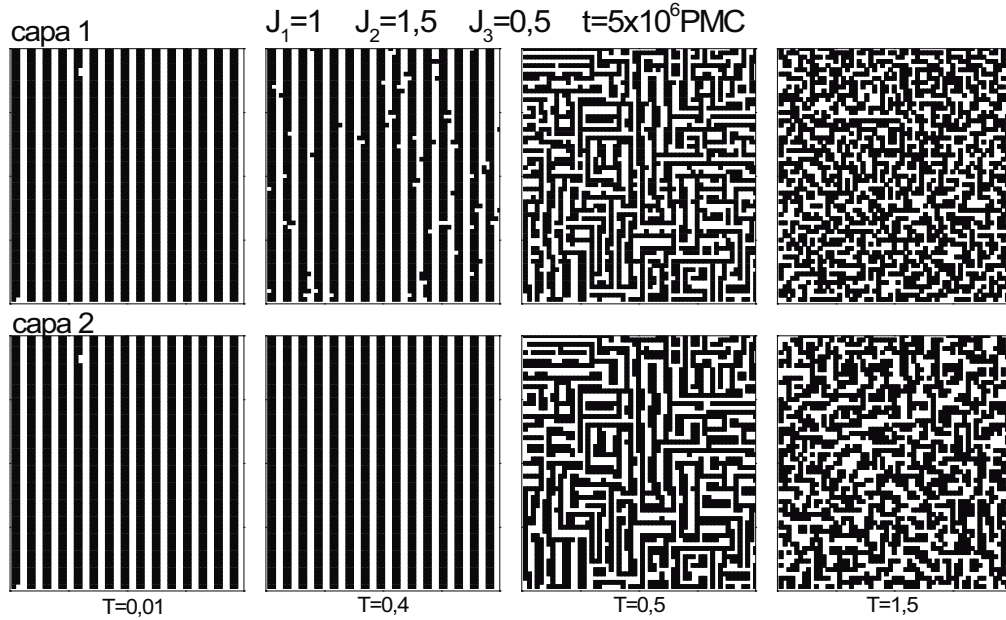


Figura 18: Configuraciones de equilibrio ($t = 5 \times 10^6 \text{ PMC}$), a las temperaturas indicadas, para el caso $J_1 = 1, J_2 = 1,5, J_3 = 0,5$ y $L = 64$. La fila superior corresponde a la capa 1 mientras que la inferior a la capa 2.

El análisis de dinámica de tiempos cortos se realizó hasta $t = 5041 \text{ PMC}$ para un sistema de tamaño $L = 128$. En la figura 19 se muestra la evolución

del O_{hv} cuando el sistema parte de la configuración del estado fundamental (ordenado, franjas de ancho h_2).

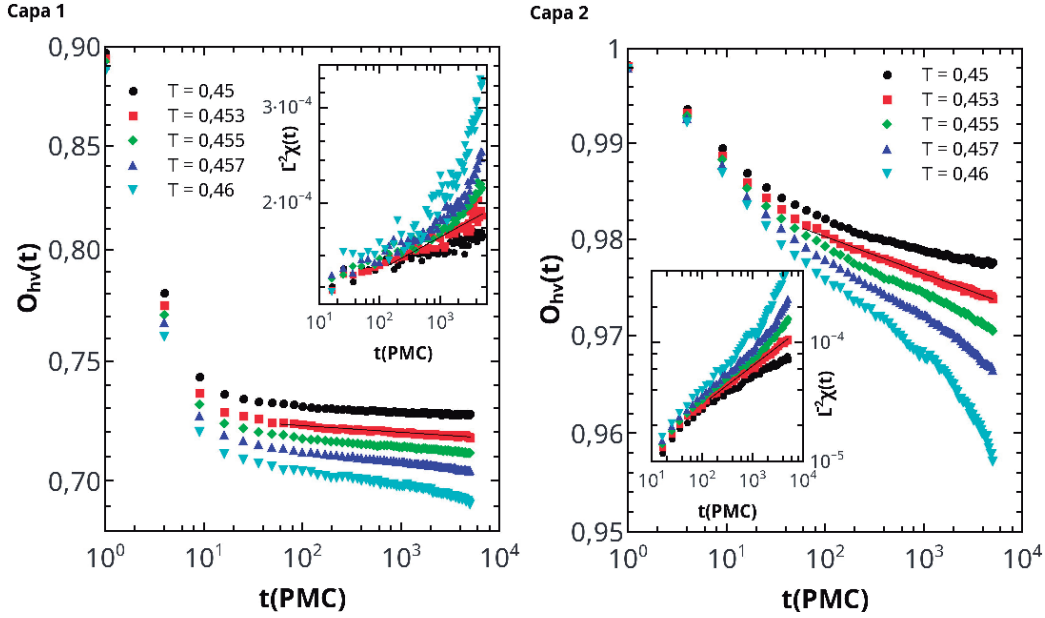


Figura 19: Gráficos *log-log* de la evolución del parámetro de orden $O_{hv}(t)$ a distintas temperaturas, para $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$. En los insets se exhiben las susceptibilidades $\chi(t)$ para cada capa. Las líneas sólidas, en los gráficos e insets, corresponden a los ajustes de ley de potencia.

Se realizaron ajustes de acuerdo con las ecuaciones (47) y (48). El mejor comportamiento de ley de potencias se obtuvo para $T_t = 0,453(3)$ para ambas capas. Esta temperatura se definió a partir del comportamiento de la susceptibilidad, que se muestra en los insets de la figura 19. La temperatura obtenida es intermedia entre los valores para el caso sin acoplamiento entre capas ($J_3 = 0$), $T = 0,395(1)$ y $T = 0,572(1)$ para las capas 1 y 2 respectivamente. Este resultado es indicativo de que la interacción entre capas estabiliza térmicamente el orden orientacional en la capa 1 (de menor constante de intercambio) pero lo reduce para la capa 2.

Los exponentes dinámicos $\beta/\nu z$ de la relajación del O_{hv} desde el estado fundamental de la bicapa, coinciden dentro del error para ambas capas, siendo mucho menores a los determinados para las monocapas ver Tablas 2 y 5.

Si el sistema es iniciado desde el estado PM, correspondiente a configuraciones desordenadas de ambas capas, la temperatura en la cual la evolución de

$O_{hv}^2(t)$ exhibió una ley de potencia fue estimada en $T_t = 0,46(1)$ para ambas capas. La figura 20 muestra la evolución del $O_{hv}^2(t)$ para varias temperaturas, junto con el ajuste por ley de potencias a $T_t = 0,46$.

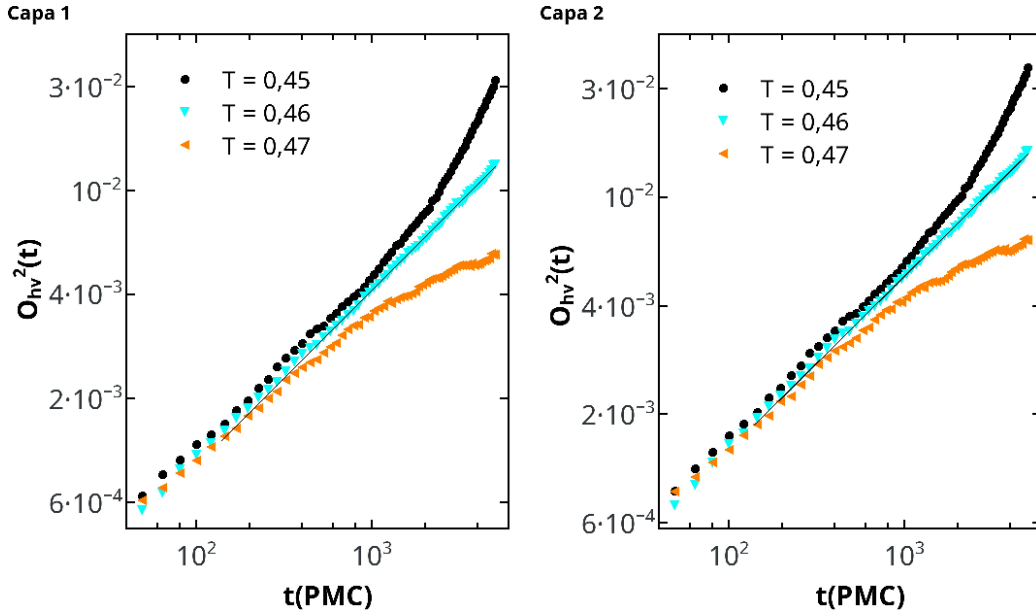


Figura 20: Evolución de $O_{hv}^2(t)$ a las temperaturas indicadas, correspondiente a $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$. Las líneas sólidas corresponden a los ajustes de ley de potencia.

Las estimaciones de las temperaturas para las evoluciones desde ambos estados (ordenado y desordenado) son muy próximas, prácticamente coinciden dentro del error, con lo cual se sugiere que la transición $h - TL$ sería continua. Sin embargo, el exponente de la susceptibilidad obtenido a partir de la evolución desde el estado ordenado y desde el desordenado son diferentes, ver tabla 5. Por este motivo no es posible afirmar sin lugar a dudas que la transición sea continua y es necesario realizar un análisis complementario que confirme los resultados anteriores. Sin embargo los valores estimados para cada capa desde la fase PM son próximos a los valores correspondientes a las monocapas. Además, el exponente del $U(t)$ indica que la dinámica es más lenta que en los casos anteriores. Este efecto se acentúa en la capa 1.

En este sentido, cobra relevancia el estudio del NER. Para esto, como en los casos anteriores, se obtuvo el tiempo de relajación τ en función de T , a partir del escaleo de las curvas de O_{hv} para $T > T_c$, cuando el sistema es

iniciado desde la condición ordenada, ec. (53) de la sección 5.5. De acuerdo con este análisis, presentado en la figura 21, el ajuste de $\tau(T)$ en función de T mostró una dependencia acorde con una transición de fase continua (ec. (54)). Cabe remarcar que se utilizaron un importante número de temperaturas debido a la necesidad de confirmar los datos y a la dificultad en la determinación de la función de escala para la capa 1. El valor de la temperatura crítica estimada desde este análisis fue de $T_c = 0,443(8)$ para la capa 1 y $T_c = 0,460(5)$ para la capa 2. Estos valores están en buen acuerdo con los determinados aplicando la STD.

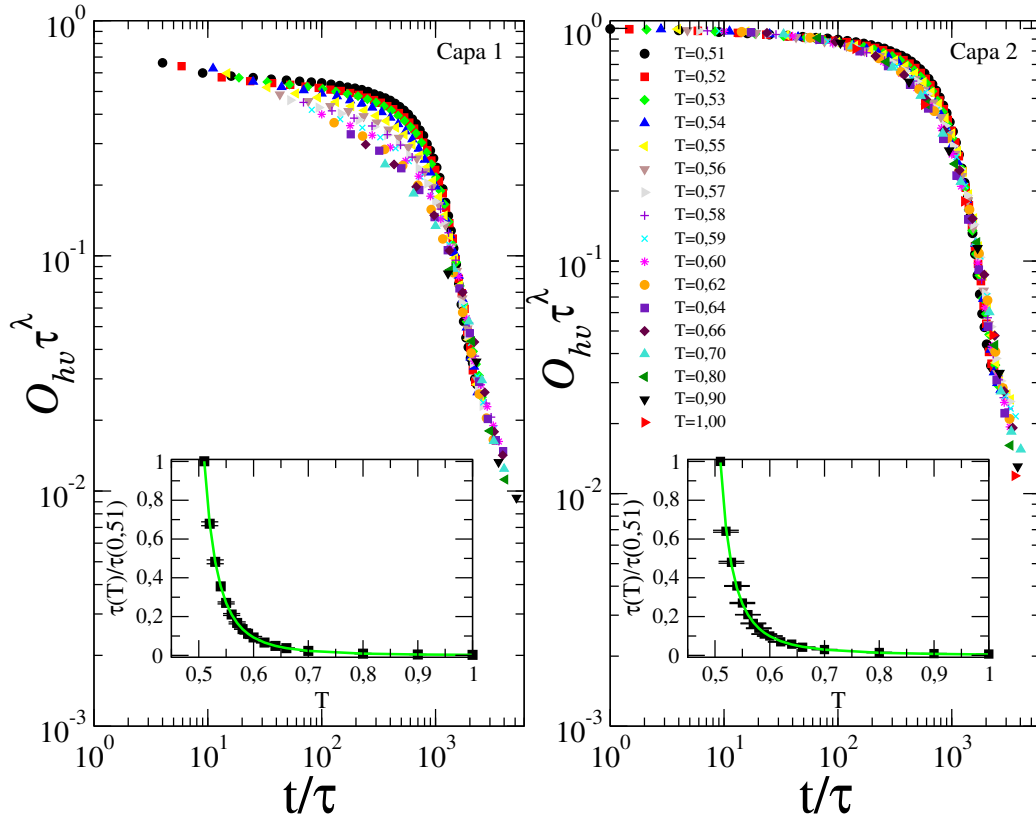


Figura 21: Escaleo del tiempo de relajación fuera del equilibrio de O_{hv} desde el estado ordenado, para $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$, para las dos capas. En inset se muestra el tiempo de relajación en función de la temperatura $\tau(T)$, el ajuste corresponde a la ec. (54).

Capa	$\beta/\nu z$ (O)	$\gamma/\nu z$ (O)	$2/z$ (O)	$\gamma/\nu z$ (D)	T_t (O)	T_t (D)
1	0,00165(4)	0,061(3)	0,062(3)	0,676(4)	0,453(3)	0.46(1)
2	0,00169(2)	0,325 (4)	0,328 (4)	0,643 (3)	0,453(3)	0.46(1)

Tabla 5: *Exponentes dinámicos y temperaturas de transición obtenidas para cada capa del caso $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 0,5$ desde ambas condiciones iniciales.*

6.4.2. Acoplamiento moderado entre capas

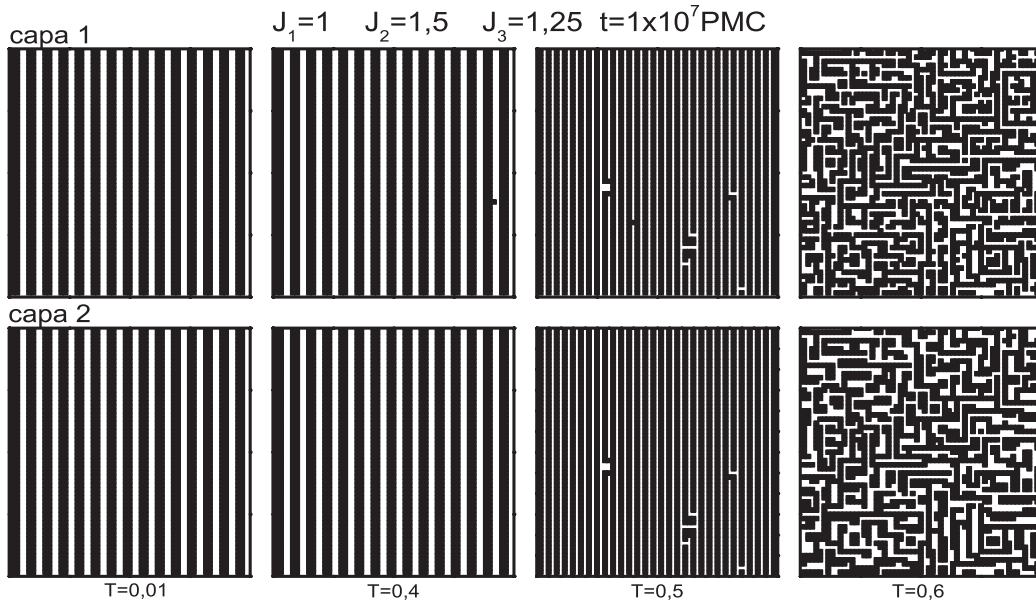


Figura 22: *Configuraciones de dominios del sistema en equilibrio para acoplamiento entre capas $J_3 = 1,25$. Se observa una fase intermedia a $T = 0,5$. Se incrementó el tiempo de simulación hasta 10^7 PMC para asegurar que se había alcanzado la configuración de equilibrio.*

En este caso se consideró una constante de interacción entre capas $J_3 = 1,25$, manteniendo los valores de $J_1 = 1$ y $J_2 = 1,5$ del caso anterior. A diferencia de lo que se observa para capas no acopladas ($J_3 = 0$) y con acoplamiento débil ($J_3 = 0,5$), aparece una fase intermedia de ancho $h = 1$ a temperaturas cercanas a $T = 0,5$. Las snapshots en torno a estas temperaturas permiten inferir que existen dos transiciones, una $h_2 - h_1$ y otra $h_1 - TL$,

ver figura 22.

La transición $h_2 - h_1$ ocurriría en el intervalo $0,4 < T < 0,5$ mientras que la transición $h_1 - TL$ se hallaría en el intervalo $0,5 < T < 0,6$; temperaturas menores a 0,4 muestran el mismo acoplamiento ferromagnético entre capas, con una fase de ancho h_2 , correspondiente al estado fundamental de la monocapa con $J = 1,5$, tal como ocurre en el caso anterior. A temperaturas mayores a $T = 0,6$ el sistema permanece en la fase TL .

La relajación de O_{hv} desde el estado fundamental muestra una ley de potencia en $T = 0,49(1)$ para ambas capas. Estos resultados son confirmados por la susceptibilidad, ver figura 23.

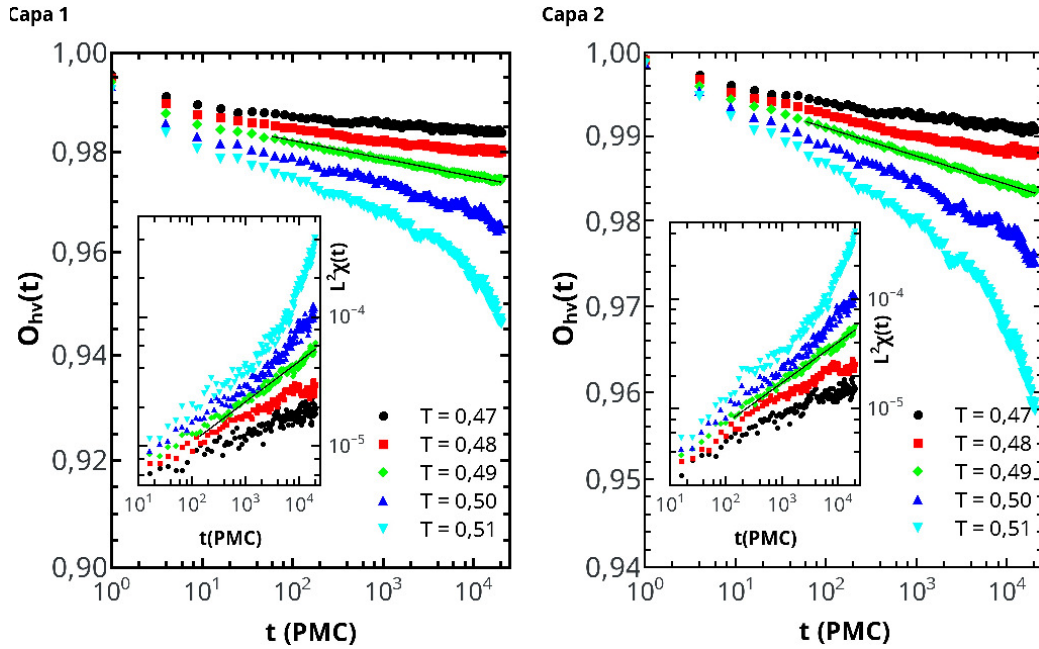


Figura 23: Gráficos log-log de la evolución del parámetro de orden $O_{hv}(t)$ a distintas temperaturas, para $J_3 = 1,25$. En los insets se muestran las susceptibilidades $\chi(t)$ para cada capa. Las líneas sólidas, en los gráficos e insets, corresponden a los ajustes de ley de potencia.

Las figuras 24 y 25 muestran la relajación de $O_h v^2(t)$ desde la fase PM, para temperaturas $T \leq 0,5$ y $T \geq 0,5$ respectivamente.

En el intervalo $0,20 \leq T \leq 0,50$, muestra varias particularidades (figura 24). La primera de ellas es que el $O_h v^2(t)$ presenta valores menores a T más bajas, en contradicción con lo esperado, indicando que el sistema aparenta

un orden menor. La segunda particularidad es que no se observa el comportamiento tipo ley de potencia en el entorno de $T = 0,49$, valor obtenido desde la evolución del estado ordenado. En la zona de transición, $0,45 \leq T \leq 0,50$, existe una competencia entre el decrecimiento de estructuras de ancho h_2 y crecimiento de estructuras de ancho h_1 con la T . Esto provoca tanto que el O_{hv}^2 no muestre la ley de potencias como los valores menores de este observable a las T más bajas. El comportamiento a $T < 0,45$ se debe a una dinámica más lenta en este régimen, causando que el sistema necesite más tiempo para ordenarse.

Por otra parte, en el intervalo $0,50 \leq T \leq 0,55$, O_{hv}^2 es capaz de detectar la transición h_1-TL . En efecto, la figura 25 muestra una ley de potencias en $T = 0,530$, y las desviaciones típicas a temperaturas bajas y altas, producto de las funciones de escala universales dependientes de T .

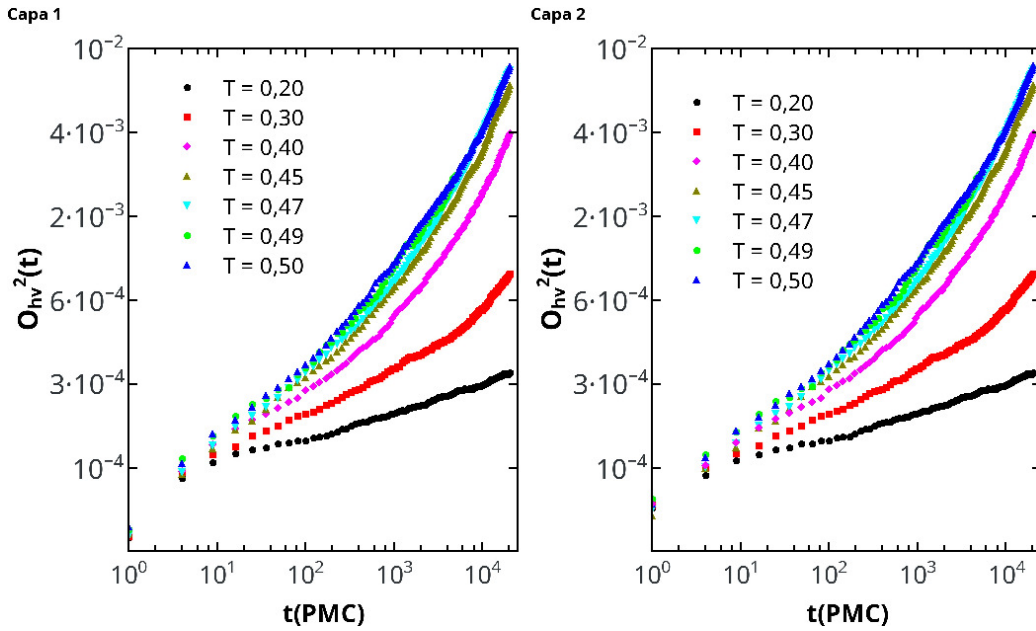


Figura 24: Gráficos log-log de la evolución de $O_{hv}^2(t)$ para $J_3 = 1,25$ y temperaturas $0,20 \leq T \leq 0,50$.

Debido a que O_{hv} no permite distinguir entre franjas de distinto ancho, sino que distingue cuando se pierde el orden orientacional, es necesario estudiar las transiciones con parámetros de orden sensibles a la estructura que lo origina, las fases h_1 y h_2 . Se definen los siguientes parámetros de orden

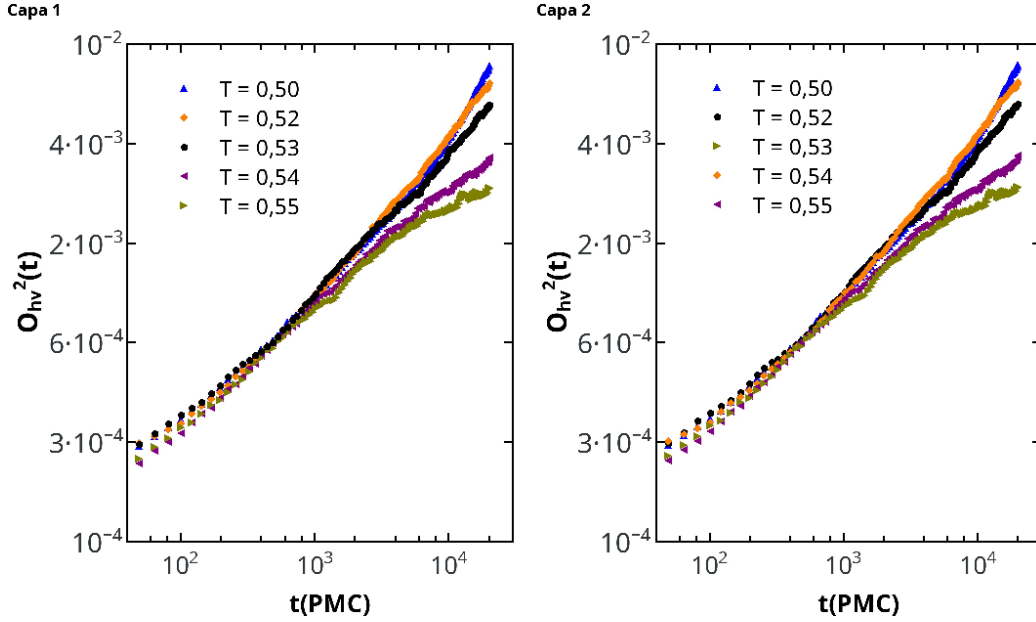


Figura 25: Gráficos log-log de la evolución de $O_{hv}^2(t)$ para $J_3 = 1, 25$ y temperaturas $0,50 \leq T \leq 0,55$.

adicionales:

$$O_{hv1} = \frac{n_{h1} - n_{v1}}{n_h + n_v} \quad O_{hv2} = \frac{n_{h2} - n_{v2}}{n_h + n_v}, \quad (55)$$

donde $n_{h1}(v1)$ es el número de espines desapareados orientados horizontalmente (verticalmente) en bandas de ancho 1, y $n_{h2}(v2)$ es lo mismo pero en franjas de ancho 2. A partir de estas dos definiciones se pueden calcular, de manera similar a lo expuesto en la sección 5.3.3, el segundo momento, la susceptibilidad y el cumulante de Binder.

Para el estudio de la transición $h_2 - h_1$, se analizó la evolución temporal de estos parámetros, utilizando STD, para el sistema iniciando desde la fase PM. En las figuras 26 y 27 se muestra la evolución temporal de O_{hv1}^2 y O_{hv2}^2 respectivamente. En el caso de la relajación de O_{hv1}^2 , en ambas capas se obtuvo el mejor comportamiento de ley de potencia para la curva correspondiente a $T = 0,53(2)$. Por claridad esta curva y su ajuste se muestra en el inset. Por su parte, la evolución del O_{hv2}^2 evidencia el comportamiento típico de la STD y permite determinar una T para la mejor ley de potencia a $T = 0,49(2)$. El ajuste para dicha curva se muestra en el inset de la figura

27. En resumen, el análisis de O_{hv1}^2 y O_{hv2}^2 , permitió determinar la existencia de las dos transiciones esperadas de acuerdo a las snapshots de la figura 22.

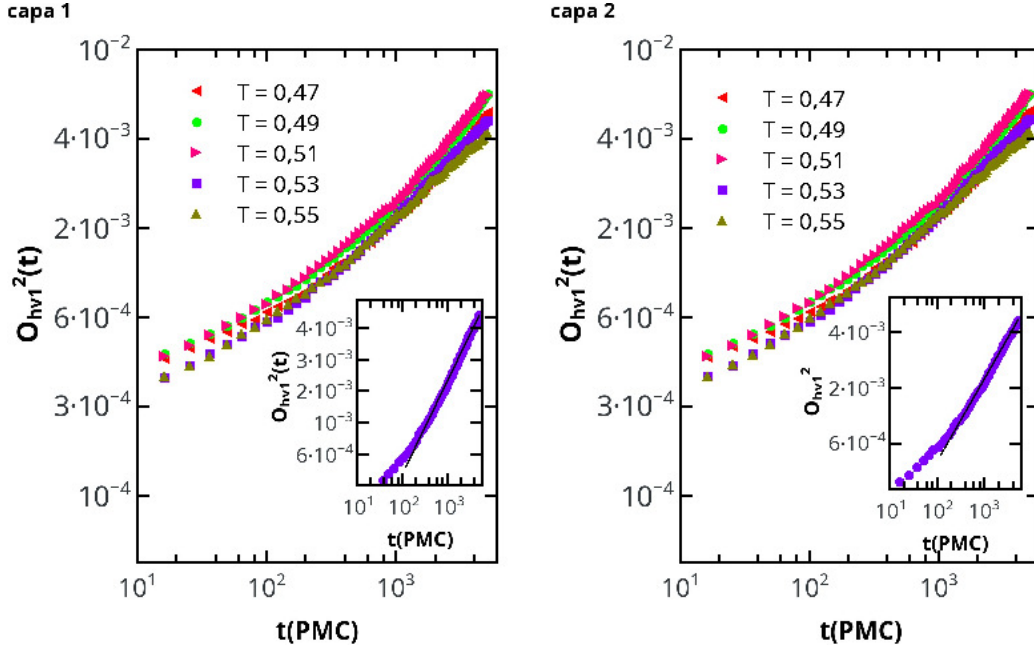


Figura 26: Evolución temporal de $O_{hv1}^2(t)$, para el sistema iniciado desde el estado desordenado a las temperaturas indicadas en las leyendas. En inset se muestra la curva correspondiente a $T = 0,53$ y el ajuste de ley de potencia.

Finalmente se efectuó un análisis NER determinándose el tiempo de relajación $\tau(T)$. Los gráficos principales de la figura 28 muestran el colapso de las evoluciones dinámicas del O_{hv} a las temperaturas indicadas en la leyenda, mientras que los insets muestran el ajuste de los tiempos de relajación τ con la expresión (54). Los resultados indican una transición continua a las $T_c = 0,521(5)$ para la capa 1 y $T_c = 0,530(5)$ para la capa 2, que pueden asociarse a la transición $h_1 - TL$. Estos resultados están en excelente acuerdo con los obtenidos desde la STD para el O_{hv1}^2 .

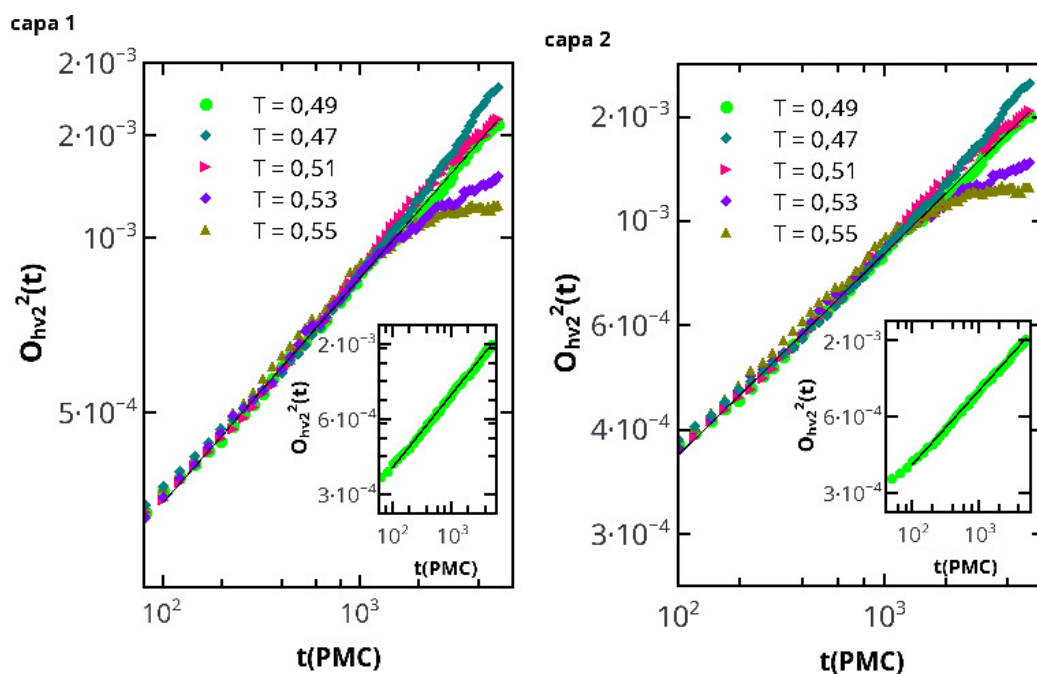


Figura 27: Evolución temporal de $O_{hv2}^2(t)$ cuando el sistema parte desde el estado desordenado. En los inset se muestran las curvas correspondientes a $T = 0,53$ y los ajustes de ley de potencia.

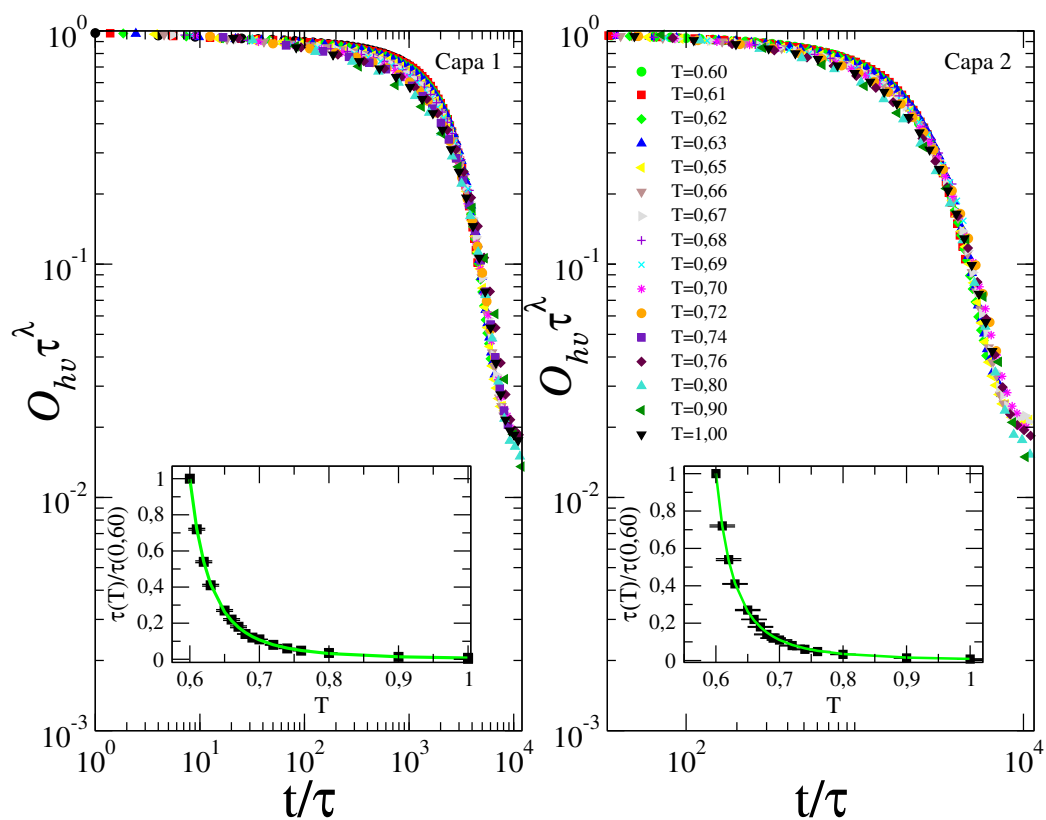


Figura 28: Escaleo del tiempo de relajación de O_{hv} desde el estado ordenado, para las dos capas y los valores de los parámetros $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 1,25$. En el inset se muestra $\tau(T)$, junto con el ajuste correspondiente.

6.5. Casos con acoplamiento fuerte

En esta sección se muestran algunos resultados preliminares correspondientes a valores de $J_3 > \frac{J_1+J_2}{2}$. En estos casos los tiempos de relajación son mayores, por lo que las simulaciones para los estados de equilibrio, a las distintas temperaturas, se realizaron todas hasta $10^7 PMC$, con el objetivo de alcanzar las configuraciones estables a bajas temperaturas.

El caso $J_3 = 2,5$ presenta desorden a todas las temperaturas excepto para $T = 0,5$, donde se observa una configuración que podría estar relacionada con fases en coexistencia o que no se alcanzó aun la configuración de equilibrio. La misma requerirá un estudio más detallado para determinar la posibilidad de una ruptura inversa de simetría. En la figura 29 se muestran las configuraciones de equilibrio para las dos capas.

Para $J_3 = 5$, la observación de las configuraciones de equilibrio obtenidas, presentadas en la figura 30, indica que ninguna de las capas presenta orden orientacional a ninguna de las temperaturas estudiadas.

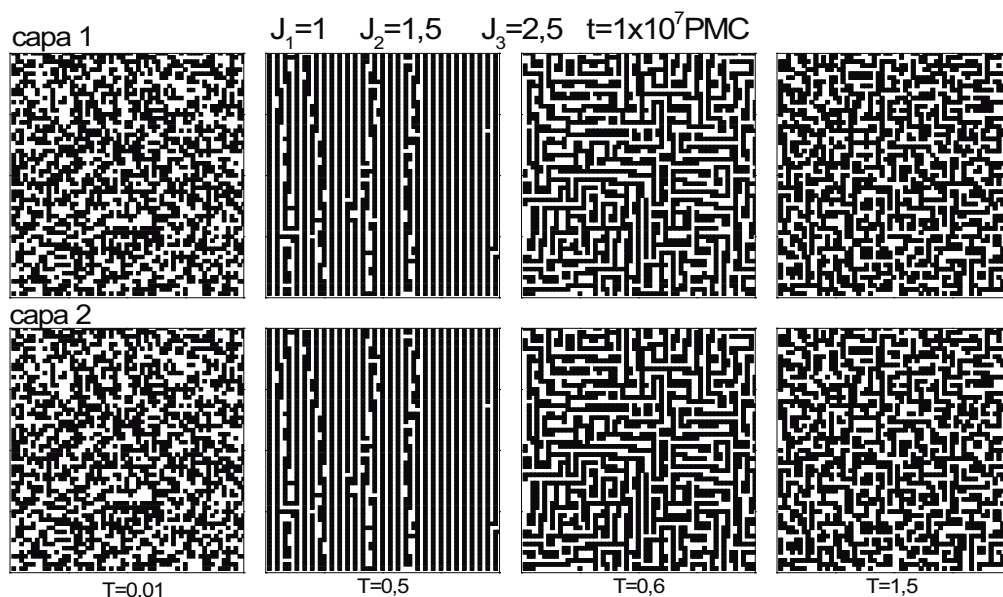


Figura 29: Configuraciones para $10^7 PMC$ en el caso $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 2,5$ para la capa 1 en la fila superior y capa 2 en la fila inferior, a las temperaturas indicadas.

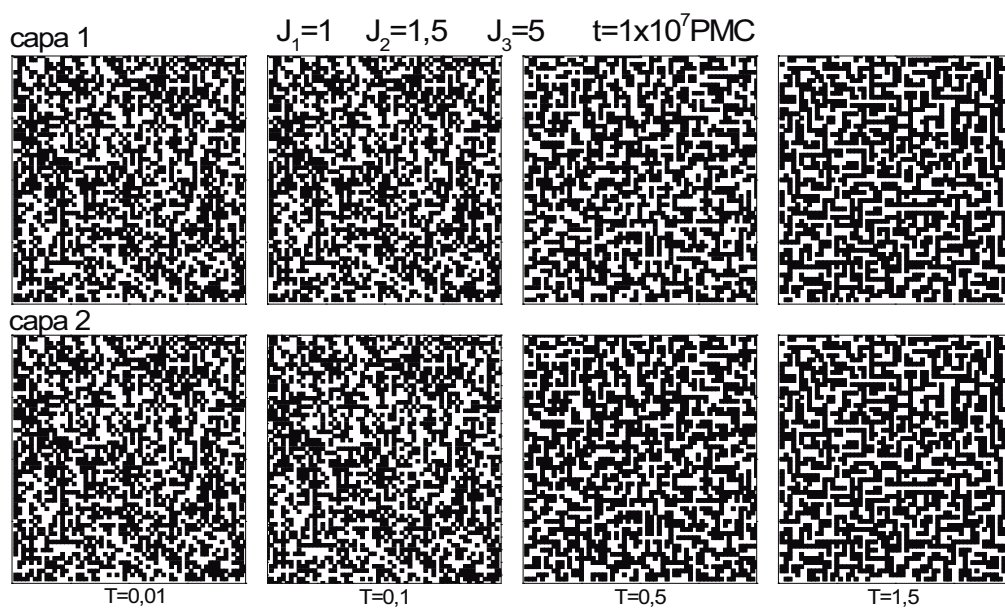


Figura 30: Configuraciones de equilibrio para el caso $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 5$ a las temperaturas indicadas, para las capas 1 y 2.

7. Conclusiones y perspectivas

En este trabajo se abordó el estudio de un sistema magnético bicapa, compuesto por películas magnéticas ultradelgadas acopladas ferromagnéticamente. El mismo fue modelado como redes cuadradas discretas, superpuestas, con espines clásicos tipo Ising. Para ello se consideró un Hamiltoniano que incluye términos de interacción de intercambio a primeros vecinos e interacciones dipolares entre espines de una misma capa, mientras que el acoplamiento entre capas se modeló como una interacción de intercambio a primeros vecinos.

Para los estados fundamentales de la bicapa magnética se comprobó que presentan estructuras de dominios consistentes con las observadas en las monocapas, es decir, se forman estructuras de dominios de franjas cuyo ancho varía de acuerdo a los valores de los parámetros asociados con las interacciones de intercambio y dipolares (J y g). En consecuencia, éstas son producto de la competencia entre las interacciones de intercambio y dipolares.

En todos los casos estudiados la interacción entre capas dio como resultado un acoplamiento ferromagnético de las estructuras de dominios a todas las temperaturas (T) estudiadas. Al aumentar la T las capas se desordenan, presentando una transición hacia la fase tetragonal líquida (TL); excepto en el caso de mayor acoplamiento estudiado ($J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 5$), donde se observó una fase desordenada independientemente de la T .

El análisis de la relajación del parámetro de orden mediante dinámica de tiempos cortos (STD) y de los tiempos de relajación en función de T (NER), permitió caracterizar las transiciones, así como determinar las temperaturas a las cuales se producen.

Se pudo establecer que el acoplamiento entre capas produce variaciones, respecto de las monocapas correspondientes, tanto en las temperaturas de transición como en las fases que presenta el sistema. Las transiciones h_n - TL observadas pudieron clasificarse como transiciones continuas; aplicando la STD, cuando fue posible se obtuvieron los exponentes críticos correspondientes a las mismas.

Es interesante destacar la existencia de una transición h_2 - h_1 , cuyo parámetro de control es la T , en lugar de la relación $\delta = J/g$ como ocurre en las monocapas.

Como perspectivas a futuro se puede mencionar: la profundización del estudio del caso $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 1,25$, centrando la atención en caracterizar las transiciones observadas mediante los parámetros de orden adecuados. En el caso $J_1 = 1$, $J_2 = 1,5$ y $J_3 = 2,5$ el estudio de la existencia

de una transición desorden-orden con T . Finalmente, el estudio de un modelo con espines continuos tipo Heisenberg, que incluya en el Hamiltoniano un término de anisotropía permitiendo la posibilidad de una componente de magnetización en el plano de la película.

Referencias

- [1] C. M. Horowitz, M. A. Bab, M. Mazzini, M. L. R. Puzzo, and G. P. Saracco, “Phase transitions and critical phenomena in the two-dimensional ising model with dipole interactions: A short-time dynamics study,” *Phys. Rev. E*, vol. 92, p. 042127, Oct 2015.
- [2] J. S. M. Fonseca, L. G. Rizzi, and N. A. Alves, “Stripe-tetragonal phase transition in the two-dimensional ising model with dipole interactions: Partition function zeros approach,” *Phys. Rev. E*, vol. 86, p. 011103, Jul 2012.
- [3] M. Carubelli, O. V. Billoni, S. A. Pighín, S. A. Cannas, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit, “Spin reorientation transition and phase diagram of ultrathin ferromagnetic films,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 134417, Apr 2008.
- [4] K. De’Bell, A. B. MacIsaac, and J. P. Whitehead, “Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 72, pp. 225–257, Jan 2000.
- [5] S. A. Pighín and S. A. Cannas, “Phase diagram of an ising model for ultrathin magnetic films: Comparing mean field and monte carlo predictions,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 224433, Jun 2007.
- [6] S. A. Cannas, M. F. Michelon, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit, “Ising nematic phase in ultrathin magnetic films: A monte carlo study,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 184425, May 2006.
- [7] N. R. Álvarez, J. E. Gómez, M. V. Mansilla, B. Pianciola, D. G. Actis, G. J. Gilardi, L. Leiva, J. Milano, and A. Butera, “Magnetic coupling of stripe domains in FePt/n_i80fe₂₀bilayers,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 50, p. 115001, feb 2017.
- [8] E. E. Fullerton, J. S. Jiang, and S. D. Bader, “Hard/soft magnetic heterostructures: model exchange-spring magnets,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 200, pp. 392–404, Oct. 1999.
- [9] A. Baruth, D. J. Keavney, J. D. Burton, K. Janicka, E. Y. Tsymbal, L. Yuan, S. H. Liou, and S. Adenwalla, “Origin of the interlayer exchange

- coupling in [Co/Pt]/NiO/[Co/Pt] multilayers studied with xas, xmed, and micromagnetic modeling,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 054419, Aug 2006.
- [10] J. Coey, *Magnetism and magnetic materials*, ch. 8.3.2. Cambridge University Press, 2009.
- [11] M. A. Bab, C. M. Horowitz, M. L. Rubio Puzzo, and G. P. Saracco, “Phase transitions and multicritical behavior in the ising model with dipolar interactions,” *Phys. Rev. E*, vol. 94, p. 042104, Oct 2016.
- [12] M. A. Bab and G. P. Saracco, “Evidence of kosterlitz-thouless phase transitions in the ising model with dipolar interactions,” *Phys. Rev. E*, vol. 100, p. 022143, Aug 2019.
- [13] I. Booth, A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, and K. De’Bell, “Domain structures in ultrathin magnetic films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 950–953, Jul 1995.
- [14] N. W. Ashcroft and D. N. Mermin, *Solid State Physics*. Harcourt College Publishers, 1976.
- [15] J. Coey, *Magnetism and magnetic materials*. Cambridge University Press, 2009.
- [16] L. G. Rizzi and N. A. Alves, “Phase transitions and autocorrelation times in two-dimensional ising model with dipole interactions,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 405, no. 6, pp. 1571–1579, 2010.
- [17] S. Blundell, *Magnetism in condensed matter*, ch. 8.9.3. Oxford University Press, 2001.
- [18] J. Coey, *Magnetism and magnetic materials*, ch. 8.2.1. Cambridge University Press, 2009.
- [19] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford University Press, 1992.
- [20] J. J. Binney, N. Dowrick, A. Fisher, and M. Newman, *The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group*. Oxford University Press, 1992.

-
- [21] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 1996.
- [22] E. H. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Clarendon Press Oxford, 1971.
- [23] E. V. Albano, M. A. Bab, G. Baglietto, R. A. Borzi, T. S. Grigera, E. S. Loscar, D. E. Rodriguez, M. L. R. Puzzo, and G. P. Saracco, “Study of phase transitions from short-time non-equilibrium behaviour,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 74, p. 026501, jan 2011.
- [24] Y. Echinaka and Y. Ozeki, “Improved dynamical scaling analysis using the kernel method for nonequilibrium relaxation,” *Phys. Rev. E*, vol. 94, p. 043312, Oct 2016.