



UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Trabajo de Tesis Doctoral:

Tansiciones de fase no convencionales en sistemas fuertemente correlacionados

Tesista: Santiago A. Osorio

Director: Daniel C. Cabra

Codirector: Héctor D. Rosales

Año: 2020

Transiciones de fase no
convencionales en sistemas
fuertemente correlacionados



TESIS DOCTORAL

Autor: Santiago A. Osorio

Director: Daniel C. Cabra

Codirector: Héctor D. Rosales

Universidad Nacional de La Plata

Facultad de Ciencias Exactas

Departamento de Física

Febrero 2020

Documento maquetado con T_EX_S v.1.0+.

Transiciones de fase no convencionales en sistemas fuertemente correlacionados

Tesis para optar al grado de
Doctor de la Facultad de Ciencias Exactas

Autor:

Lic. Santiago A. Osorio

Director:

Prof. Dr. Daniel C. Cabra, Universidad Nacional de La Plata

Codirector:

Prof. Dr. Héctor D. Rosales, Universidad Nacional de La Plata

Miembros del Jurado Evaluador:

Prof. Dr. Santiago A. Grigera, Universidad Nacional de La Plata

Prof. Dr. Armando A. Aligia, Instituto Balseiro

Prof. Dr. Luis O. Manuel, Universidad Nacional de Rosario

Este trabajo fue financiado por una Beca Doctoral del CONICET y realizado en el *Instituto de Física La Plata* (durante el período 2015-2017) y el *Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos* (durante el período 2018-2020).

Universidad Nacional de La Plata
Facultad de Ciencias Exactas
Departamento de Física

Febrero 2020

*Al abuelo Ramón
y al tío Tito.*

Agradecimientos

A mis padres y a mi hermano, mi familia, por su gran amor y su apoyo constante e incondicional.

A mi segunda familia, por sus inmensas dosis de cariño.

A Aye, mi novia, por su amor y por su compañía.

A mis directores, Daniel Cabra y Diego Rosales, por su paciencia y enseñanza, y por recibirme en su grupo de trabajo.

A mi maestro Jedi, Mauricio Sturla, por entrenarme en el dominio de La Fuerza.

A la amistad y al afecto de aquellos con quienes tuve la fortuna de recorrer este camino; desde la infancia hasta la universidad, desde el campo hasta El Bosque, desde Phandalin hasta Neverwinter, y desde el “Grupo de Teoría de Materia Condensada” hasta el “Grupo Bolsa”.

Resumen

La presente tesis está dedicada al estudio de redes de skyrmiones en sistemas bidimensionales de espines incluyendo el efecto de campos magnéticos externos en modelos clásicos ferromagnéticos y antiferromagnéticos no-centrosimétricos.

En primer lugar estudiamos el caso ferromagnético incluyendo la interacción de Dzyaloshinski-Moriya y el campo magnético que resultan ser fundamentales para estabilizar una fase de red de skyrmiones. Los estudios analíticos, a temperatura nula, conducen a un diagrama de fases que revela una secuencia de estados fundamentales: fase helicoidal \rightarrow red de skyrmiones \rightarrow fase ferromagnética, conforme el campo magnético aumenta. Estos análisis fueron complementados con simulaciones numéricas de Monte Carlo que confirman el esquema de fases incluso a temperatura no nula. Mediante estas simulaciones se predicen plateaux en las curvas de magnetización que son correctamente explicadas en el marco de los estudios analíticos realizados.

En segundo lugar se estudiaron las condiciones bajo las cuales las redes de skyrmiones pueden ser estabilizadas en sistemas antiferromagnéticos. En este sentido esta tesis demuestra que la frustración tiene un rol fundamental en la estabilidad de skyrmiones en sistemas antiferromagnéticos. Se observó que las redes de skyrmiones no pueden ser un estado termodinámicamente estable en una red antiferromagnética cuadrada pero si pueden serlo en la red triangular. La textura magnética que emerge en este último sistema es novedosa al estar formada por tres redes de skyrmiones interpenetradas.

Finalmente investigamos la conexión topológica entre las redes de skyrmiones en la red antiferromagnética triangular y la presencia de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 . Encontramos una conexión directa entre ambos objetos y demostramos la posibilidad de manipular los vórtices \mathbb{Z}_2 por medio de una interacción de Dzyaloshinskii-Moriya anisotrópica sin afectar a la estabilidad de la estructura de red de skyrmiones subyacente en el sistema.

Abstract

This thesis is dedicated to the study of skyrmion lattices in two-dimensional systems of spins including the effect of external magnetic fields in classical non-centrosymmetric ferromagnetic and antiferromagnetic models.

First, we studied the ferromagnetic case including the Dzyaloshinskii-Moriya interaction and the magnetic field that turn out to be fundamental to stabilize a skyrmion lattice phase. Analytical studies, at zero temperature, lead to a phase diagram that reveals a sequence of ground states: helical phase \rightarrow skyrmion lattices \rightarrow ferromagnetic phase, as the magnetic field increases. This analysis was complemented with numerical Monte

Carlo simulations confirming the phase diagram even at non-zero temperature. Through these simulations, plateaux are predicted in the magnetization curves that are correctly explained in the framework of the analytical studies made.

Secondly, the conditions under which skyrmion lattices can be stabilized in antiferromagnetic systems were discussed. In this sense, we show that frustration plays a fundamental role in the stability of skyrmions in antiferromagnetic systems. It was observed that skyrmion lattices cannot be a thermodynamically stable state in a square antiferromagnetic system but can be stable in the triangular one. The magnetic texture that emerges in this last system is novel since it consists of three interpenetrated skyrmion lattices.

Finally, we investigated the topological connection between the skyrmion lattices in the triangular antiferromagnetic system and the presence of \mathbb{Z}_2 vortex pairs. We found a connection between both objects and demonstrated the possibility of manipulating the \mathbb{Z}_2 vortices through an anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interaction, without affecting the stability of the underlying skyrmion lattice structure in the system.

Índice

Resumen	XI
1. Introducción	1
1.1. Skyrmiones en sistemas magnéticos	1
1.1.1. Reseña histórica	1
1.1.2. Aplicaciones tecnológicas	3
1.2. Skyrmiones en otras áreas de materia condensada	3
1.3. Objetivos y estructura de la tesis	4
2. Sistemas magnéticos y clasificación de defectos topológicos	7
2.1. Sistemas e interacciones	7
2.1.1. Interacción de intercambio	7
2.1.2. Intercambio directo	10
2.1.3. Intercambio indirecto: superintercambio	11
2.1.4. Interacción de intercambio anisotrópica	13
2.1.5. Frustración magnética	14
2.1.6. Campo magnético externo	15
2.1.7. Campo eléctrico externo	16
2.2. Modelo clásico	17
2.2.1. Orden clásico y límite del continuo	18
2.3. Topología	19
2.3.1. Topología en el estudio de sistemas magnéticos	19
2.3.2. Equivalencia topológica e invariantes	20
2.3.3. Teoría de homotopía: grupos de homotopía	22
2.3.4. Clasificación de defectos topológicos	25
2.3.5. Vórtices	26
2.3.6. Skyrmiones	28
2.3.7. Vórtices \mathbb{Z}_2	29
3. Skyrmiones en sistemas ferromagnéticos	33
3.1. Skyrmiones aislados	33
3.1.1. Introducción	33
3.1.2. Estabilidad de skyrmiones: formalismo general	34
3.1.3. Aplicación del método	40

3.2.	Redes de skyrmiones	53
3.3.	Teoría efectiva y enfoque variacional para $T = 0$	54
3.4.	Simulaciones de Monte Carlo para bajas temperaturas	56
3.4.1.	Carga topológica	56
3.4.2.	Diagrama de fases	59
3.5.	El rol de la dimensionalidad	61
3.6.	Síntesis del capítulo	64
4.	Skyrmiones en sistemas antiferromagnéticos	67
4.1.	Introducción	67
4.2.	(Ausencia de) skyrmiones en la red cuadrada antiferromagnética	69
4.3.	Skyrmiones en la red triangular antiferromagnética: el rol de la frustración	73
4.4.	Hamiltoniano microscópico y simulaciones de Monte Carlo	74
4.5.	Hamiltoniano microscópico y límite del continuo	77
4.6.	Ansätze y Hamiltoniano efectivo de baja energía	80
4.6.1.	Ansätze para la red de skyrmiones	81
4.6.2.	Ansätze de hélices	81
4.6.3.	Ansätze de espín uniforme por subred	82
4.6.4.	Teoría efectiva de baja energía	84
4.7.	Resultados y diagrama de fases	85
4.8.	Escaleo de la energía	88
4.9.	Comparación con simulaciones de Monte Carlo	90
4.10.	Discusión y conclusiones	91
5.	Vórtices en sistemas antiferromagnéticos	93
5.1.	Introducción	93
5.2.	Antiferromagneto de Heisenberg en la red triangular: vórtices \mathbb{Z}_2	94
5.3.	Antiferromagneto de Heisenberg en la red triangular: redes de vórtices \mathbb{Z}_2 .	95
5.4.	Modelo y aproximación de Luttinger-Tisza	96
5.5.	Simulaciones de Monte Carlo: estudio del factor de estructura para la fase AF-SkX	100
5.6.	Diagrama de fases	101
5.7.	Vórtices \mathbb{Z}_2	103
5.7.1.	Simulaciones de Monte Carlo	106
5.7.2.	Teoría de campo efectiva	106
5.8.	Cálculo de la vorticidad	108
5.9.	Número de Vórtices como función de la temperatura	109
5.10.	Resumen	110
6.	Conclusiones	113
6.0.1.	Skyrmiones en sistemas ferromagnéticos	113
6.0.2.	Skyrmiones en sistemas antiferromagnéticos	114
6.0.3.	Skyrmiones y vórtices \mathbb{Z}_2	114

A. Expresiones y aproximaciones utilizadas en el estudio de la estabilidad de skyrmiones	117
A.1. Vector L_n y matriz M_{nm}	117
A.2. Relevancia de la discontinuidad	119
B. Método de Nelder-Mead	121
C. Aproximación de Luttinger-Tisza	125
D. Transición de Kosterlitz-Thouless	129
Bibliografía	131

Capítulo 1

Introducción

“Son los tiempos que están huecos de emoción”

Frecuencia Modulada, Serú Girán.

RESUMEN: En este capítulo haremos una revisión histórica del término skyrmión. Si bien nos enfocaremos específicamente en el estudio de skyrmiones en sistemas magnéticos, comenzaremos desde la física de altas energías, donde se introduce el término skyrmión, para finalmente comentar el interés que tiene el estudio de estos objetos y su aplicación en la física de la materia condensada, y en particular en el área del magnetismo. Por último presentaremos los objetivos de esta tesis.

1.1. Skyrmiones en sistemas magnéticos

1.1.1. Reseña histórica

Los skyrmiones fueron originalmente propuestos por T. R. H. Skyrme en física nuclear. Su primera publicación de 1954 puede considerarse como fecha inicial del modelo de Skyrme [1, 2]. En ese trabajo se propuso un modelo de fluido mesónico con el objeto de explicar datos experimentales de mediciones de radios nucleares. En los años siguientes continuó con el desarrollo de su teoría hasta arribar a un modelo para bariones en física nuclear [3, 4]. A partir de esta teoría es que se introduce el término “skyrmión” (del inglés skyrmion). Skyrme entendía a los nucleones (protones y neutrones) como si se movieran en un medio no lineal clásico de piones. Su teoría, que surge del modelo de Yukawa, contiene tres campos escalares correspondientes a los tres piones (π^+ , π^- y π^0), y el skyrmión representaba al barión [1, 3–5]. En este contexto los skyrmiones son configuraciones de mínima energía de campos estáticos clásicos no lineales y se puede mostrar que estas soluciones corresponden a solitones topológicos [5].

En 1975 Belavin y Polyakov encontraron las soluciones correspondientes a distintos sectores topológicos para un sistema ferromagnético [6]. En 1989 Bogdanov y colaboradores predijeron la existencia de redes de skyrmiones en ferromagnetos anisotrópicos no centrosimétricos al aplicar campos magnéticos [7–10]. Estos skyrmiones se observaron por

primera vez experimentalmente estudiando el efecto Hall cuántico [11]. Sin embargo la existencia de skyrmiones formando redes fue verificada experimentalmente sólo recientemente. En 2009 [12] se encontró evidencia clara de que los skyrmiones aparecen formando una red en la llamada fase “A” del compuesto MnSi (ferromagneto metálico) [12–14]. La evidencia proviene de experimentos de dispersión de neutrones a pequeños ángulos (SANS, de sus siglas en inglés) que revelan un patrón hexagonal de skyrmiones. Recientemente se han realizado observaciones directas, tanto de skyrmiones aislados como de redes de skyrmiones, mediante microscopía electrónica de transmisión de Lorentz (Lorentz TEM, de sus siglas en inglés) [15]. En general, este tipo de textura está asociada a la ausencia de simetría de inversión [16–19], por lo que se presenta en sistemas no centrosimétricos, como es el caso de cristales magnéticos de MnSi [7], $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{Si}$ [20, 21] (y en general para semiconductores $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [22–25]), FeGe [26–34], en semiconductores con estructura B20 [35] y el aislador Cu_2OSeO_3 [36, 37]. El mecanismo subyacente responsable de esta estructura parece ser una interacción efectiva antisimétrica, conocida como interacción de Dzyaloshinskii-Moriya (DM), cuyo origen proviene del acoplamiento espín-órbita [38, 39]. En los cristales magnéticos no centrosimétricos genéricos una interacción de DM pueden estabilizar una fase de cristal de skyrmiones (SkX). La existencia de estas estructuras en los magnetos quirales se predijo teóricamente en una serie de trabajos (ver Refs. [7, 9, 10, 30]). Más tarde, Yi et al. [11] demostraron mediante el uso de simulaciones de Monte Carlo que un sistema de espines ferromagnético clásico con interacción DM soporta, en una región dada del espacio de parámetros, estructuras de red de skyrmiones.

Las teorías que describen estos sistemas conducen al estudio de excitaciones topológicas que desempeñan un rol fundamental en muchas áreas de la física [40]. En el transcurso de las últimas décadas (en el contexto de materia condensada, y más precisamente en el estudio de fenómenos magnéticos y sistemas de espines), el término skyrmión ha ganado progresivamente aceptación para designar cualquier solución o configuración de campo que está localizada, es topológicamente estable y tiene el aspecto de vórtice [41]. Debemos aclarar que estas soluciones no tienen ningún vínculo con el modelo de Skyrme mencionado antes, excepto por el hecho de que en ambos contextos las soluciones corresponden a solitones con propiedades topológicas análogas (que describiremos en capítulos siguientes).

Por otra parte, otro tipo de objetos topológicos de gran interés en la comunidad de la materia condensada son los vórtices. Se sabe que este tipo de configuraciones singulares pueden ser estabilizadas en el modelo XY ferromagnético (en este modelo los momentos magnéticos son planares y tienen solo dos componentes). En este modelo los vórtices aparecen formando pares a bajas temperaturas y existe una transición de fase topológica en la que esos pares se rompen [42, 43]. Existen ejemplos adicionales de sistemas en los que es posible estabilizar configuraciones solitónicas con estructura de vórtice y que serán de interés en esta tesis. Este es el caso de los sistemas antiferromagnéticos frustrados, cuyas configuraciones pueden ser descritas por un parámetro de orden $\text{SO}(3)$. En este caso, la teoría de baja energía puede soportar defectos topológicos conocidos como vórtices \mathbb{Z}_2 y presentan una fenomenología muy similar a la que tiene lugar en el modelo XY (descrito por un parámetro de orden S^1) [42, 43]. En este caso, como demostraron Kawamura y Miyashita (1984), pares de vórtices \mathbb{Z}_2 pueden ser activados térmicamente y al incrementar la temperatura estos vórtices son liberados [44].

1.1.2. Aplicaciones tecnológicas

Desde su descubrimiento, los skyrmiones magnéticos han ganado una atención creciente no solo por sus interesantes propiedades físicas sino también por sus potenciales aplicaciones tecnológicas. Esto se debe fundamentalmente a la demostración de que estos objetos tienen un gran potencial tecnológico en el área de la espintrónica para el desarrollo de futuras generaciones de dispositivos magnéticos de memoria y procesamiento de información. Desde este punto de vista las cualidades más destacadas de los skyrmiones son su gran estabilidad, pequeño tamaño y la necesidad de corrientes eléctricas muy bajas para crearlos, destruirlos o moverlos [16–19, 45, 46]. Se requieren, por ejemplo, corrientes de $j_c \approx 10^6 \text{ Am}^{-2}$ para mover skyrmiones en un cristal de MnSi, que son unas 10^5 veces más chicas que las necesarias para controlar paredes de dominios en sistemas ferromagnéticos [47, 48]. En el estado actual de la tecnología es posible no solo crear skyrmiones aislados sino también redes bidimensionales de skyrmiones por medio de la impresión de nanodiscos magnéticos sobre láminas magnetizadas [49]. Debido a una propiedad topológica de los skyrmiones (cuantificada mediante su carga topológica) es posible emplearlos como elementos de computación para representar los bits “1” y “0”, asociados a la existencia y ausencia de skyrmiones respectivamente. Debido a estas características es que se los estudia en el campo de la espintrónica para el diseño de dispositivos de almacenamiento de información de bajo consumo [50, 51].

Uno de los dispositivos en los que se prevé una aplicación de los skyrmiones son los llamados “racetrack memory” (RM). El concepto de este tipo de memoria magnética fue propuesto hace más de 10 años [52], en la que la información digital es codificada en paredes de dominios que se pueden desplazar a través de una línea de transmisión magnética. En los RM basados en skyrmiones, la información es codificada utilizando skyrmiones que pueden ser desplazados por medio de corrientes de espín [53] así como ondas de espines [54].

Otra de las posibles aplicaciones apunta al desarrollo de compuertas lógicas basadas en skyrmiones. El mecanismo básico que permite este desarrollo es la conversión entre un par de paredes de dominio y skyrmiones conectando líneas de transmisión de diferentes anchos [55]. Por medio de este mecanismo es posible realizar la duplicación y unión de skyrmiones, y usar estos procesos para el desarrollo de compuertas lógicas [56].

1.2. Skyrmiones en otras áreas de materia condensada

La existencia de estas estructuras topológicas de espín de escala nanoscópica, llamadas skyrmiones, es bien conocida desde hace mucho tiempo y se pueden encontrar en varios sistemas de interés en materia condensada. Comentaremos brevemente algunos de estos sistemas entre los cuales se encuentran sistemas de Hall cuánticos (QH), cristales líquidos y átomos fríos, entre otros [57]. Los skyrmiones se pueden formar en los sistemas QH debido a la competencia entre una interacción de intercambio y un acoplamiento de Zeeman. Sin embargo, la interacción de intercambio favorece un estado ferromagnético del campo de espines por lo que se requiere de temperaturas suficientemente elevadas para deformar el estado uniforme y crear skyrmiones [58, 59]. En cristales líquidos las estructuras topológicas de dipolos eléctricos, consideradas como skyrmiones, han sido ob-

servadas en la “fase azul” [16, 60]. Si bien la estructura de la fase azul se conoce desde hace varias décadas [60], esta fue recientemente relacionada con los skyrmiones [16]. La existencia de los skyrmiones también fue predicha en sistemas de átomos fríos. Cuando un gas de bosones es enfriado a temperaturas cercanas al cero absoluto (es decir menores a 10^{-6}K), exhibe una fase llamada condensado de Bose-Einstein (BEC). Como en muchos otros sistemas físicos, pueden existir vórtices en un BEC [16] que carecen de un núcleo y han sido referidos como skyrmiones [61]. En efecto, las estructuras observadas en BEC son texturas topológicas cuya distribución de espines es análoga a la de los skyrmiones.

1.3. Objetivos y estructura de la tesis

El objetivo central de esta tesis es estudiar la presencia de fases topológicamente no triviales en sistemas magnéticos. Las fases en las que estaremos interesados incluyen redes de skyrmiones y vórtices \mathbb{Z}_2 en sistemas ferromagnéticos y antiferromagnéticos.

Con el fin de que la tesis sea autocontenida, introducimos en el Capítulo 2 nociones básicas de las interacciones magnéticas en sistemas de espines. Más aún, haremos una revisión que, lejos de ser exhaustiva y rigurosa, provee las herramientas de topología necesarias para abordar el estudio de los solitones topológicos. Aquí introducimos elementos de teoría de homotopía, clasificación de defectos topológicos y una breve descripción de las propiedades de los solitones que serán tema central de esta tesis: skyrmiones y vórtices \mathbb{Z}_2 .

Los Capítulos 3, 4 y 5 contienen los resultados más importantes del trabajo desarrollado en la elaboración de esta tesis. En estos capítulos además se realiza una exposición del contexto en el cual nuestros aportes fueron realizados y complementa nuestros estudios. El Capítulo 3 está dedicado al estudio de la estabilidad de skyrmiones en sistemas ferromagnéticos. Introducimos un método general para estudiar la estabilidad y la posibilidad de deformar skyrmiones aislados por medio de perturbaciones externas o microscópicas. El tema central de este capítulo corresponde a los resultados publicados en el artículo PRB **99**, 064439 (2019). Hacia el final haremos una breve discusión sobre la estabilidad de redes de skyrmiones.

En el Capítulo 4 se estudian sistemas antiferromagnéticos con la atención puesta en la búsqueda de redes de skyrmiones. Este estudio está directamente relacionado al papel que juega la frustración magnética en la estabilidad de redes de skyrmiones. Los resultados centrales de este capítulo se encuentran publicados en el artículo PRB **96**, 024404 (2017).

En el Capítulo 5 el foco de atención se vuelca al estudio de otro tipo de objetos topológicos, los vórtices \mathbb{Z}_2 . En este capítulo se pone en evidencia la conexión que existe entre las redes de skyrmiones en un sistema antiferromagnético frustrado y las redes de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 . Los resultados de este capítulo se pueden encontrar en PRB **100**, 220404(R) (2019).

Finalmente en el Capítulo 6 concluimos esta tesis con una revisión de los resultados más importantes. Aquí también presentamos una serie de interrogantes y planteos que se desprenden de los trabajos realizados y delinean las perspectivas para futuras investigaciones.

Enumeramos a continuación la lista de las publicaciones que constituyen el contenido central y los resultados fundamentales de esta tesis:

-
- S. A. Osorio, H. D. Rosales, M. B. Sturla, and D. C. Cabra, *Composite spin crystal phase in antiferromagnetic chiral magnets*, Phys. Rev. B **96**, 024404 (2017).
 - S. A. Osorio, M. B. Sturla, H. D. Rosales, and D. C. Cabra, *Stability of skyrmions in perturbed ferromagnetic chiral magnets*, Phys. Rev. B **99**, 064439 (2019).
 - S. A. Osorio, M. B. Sturla, H. D. Rosales, and D. C. Cabra, *From skyrmions to \mathbb{Z}_2 vortices in distorted chiral antiferromagnets*, Phys. Rev. B **100**, 220404 (Rapid Communication) (2019).

Capítulo 2

Sistemas magnéticos y clasificación de defectos topológicos

“Tom, how could you be so kind!”

The Adventures Of Tom Sawyer, Mark Twain.

RESUMEN: En este capítulo introduciremos algunas de las posibles interacciones entre momentos magnéticos. La competencia entre estos términos de energía puede resultar en diferentes tipos de solitones topológicos, como paredes de dominio, vórtices, skyrmiones, entre otros, que son objetos de estudio de esta tesis. Hacia el final del capítulo se introducirán algunas herramientas de topología para clasificar y estudiar las distintas configuraciones de estos sistemas magnéticos.

2.1. Sistemas e interacciones

En esta sección presentaremos un panorama general de las interacciones básicas en sistemas magnéticos que son centrales en esta tesis. Nos restringiremos a las interacciones de intercambio, en particular intercambio directo y superintercambio (a partir de la cual se obtiene la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya). Algunas de las interacciones que pueden ser relevantes en distintos sistemas magnéticos, y quedarán fuera del alcance de esta tesis, son: interacciones dipolares, doble intercambio, anisotropía cristalina, anisotropía iónica, entre otras.

En el estudio de los efectos de campos externos consideraremos acoplamientos tipo Zeeman (con un campo magnético) y acoplamientos magnetoeléctricos (con un campo eléctrico.)

2.1.1. Interacción de intercambio

La interacción de intercambio es un fenómeno cuántico que resulta del acoplamiento electrostático entre partículas idénticas [62–64]. Para entender el origen de estas interacciones consideremos un modelo sencillo de dos electrones cuyas coordenadas espaciales

son \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 . La función de onda que representa el estado conjunto puede ser escrita como el producto de estados de electrones individuales de tal forma que si $\psi_a(\mathbf{r}_1)$ y $\psi_b(\mathbf{r}_2)$ representan el estado del primer y segundo electrón respectivamente, entonces la función $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)$ representa el estado conjunto. Sin embargo, dado que los electrones son indistinguibles la función de onda $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ debe satisfacer $\hat{P}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = c\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ donde \hat{P} es el operador de permutación ($\hat{P}\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$) y c es una constante ($c = 1$ para bosones y $c = -1$ para fermiones). Vemos entonces que el estado ψ que acabamos de construir no satisface esta simetría ($\hat{P}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1) \neq c\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)$). Por lo tanto los estados que debemos considerar son estados producto simetrizados (para el caso de bosones) o antisimetrizados (para el caso de fermiones).

Para el caso de electrones (fermiones) la función de onda debe ser antisimétrica. En el caso de un único electrón, ψ tiene dos contribuciones: una espacial ϕ y una contribución del espín χ (de modo que $\psi = \phi\chi$). En el caso de dos electrones ψ debe involucrar productos de ϕ y χ en los que la simetría de cada una de estas partes es alternada, es decir, solo se admiten combinaciones de la forma:

$$\phi_A\chi_S, \quad (2.1)$$

$$\phi_S\chi_A, \quad (2.2)$$

donde con los índices A y S indicamos que la correspondiente contribución es una función antisimétrica o simétrica, respectivamente. El estado antisimétrico de la parte de espín corresponde al estado singlete ($S = 0$) y el estado simétrico en la parte de espín corresponde al estado triplete ($S = 1$). Por lo tanto tenemos que los estados posibles de singlete ψ_0 y triplete ψ_1 son

$$\psi_0 = \phi_S\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(\mathbf{r}_1)\phi_b(\mathbf{r}_2) + \phi_a(\mathbf{r}_2)\phi_b(\mathbf{r}_1)] \chi_0, \quad (2.3)$$

$$\psi_1 = \phi_A\chi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(\mathbf{r}_1)\phi_b(\mathbf{r}_2) - \phi_a(\mathbf{r}_2)\phi_b(\mathbf{r}_1)] \chi_1. \quad (2.4)$$

La energía de cada uno de estos estados es

$$\begin{aligned} E_0 &= \int \psi_0^* \hat{\mathcal{H}} \psi_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \\ E_1 &= \int \psi_1^* \hat{\mathcal{H}} \psi_1 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}$ es el Hamiltoniano del par de espines. La diferencia entre las dos energías es:

$$E_0 - E_1 = 2 \int \phi_a^*(\mathbf{r}_1)\phi_b^*(\mathbf{r}_2)\hat{\mathcal{H}}\phi_a(\mathbf{r}_2)\phi_b(\mathbf{r}_1)d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2, \quad (2.6)$$

donde hemos supuesto que los estados χ_0 y χ_1 están normalizados. Teniendo en cuenta que para el estado singlete $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = -3/4$ y para el estado triplete $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = 1/4$, podemos reescribir $\hat{\mathcal{H}}$ en la Ec. 2.5, en la forma de un Hamiltoniano efectivo que depende solo del espín

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{4}(E_0 - E_1) - (E_0 - E_1)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (2.7)$$

Descartando el término constante en la ecuación anterior, el Hamiltoniano de espín $\hat{\mathcal{H}}^{espín}$ se escribe como

$$\hat{\mathcal{H}}^{espín} = -2J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (2.8)$$

donde la integral de intercambio (o constante de intercambio) J es definida como

$$J = \frac{E_0 - E_1}{2} = \int \phi_a^*(\mathbf{r}_1)\phi_b^*(\mathbf{r}_2)\hat{\mathcal{H}}\phi_a(\mathbf{r}_2)\phi_b(\mathbf{r}_1)d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2. \quad (2.9)$$

El signo de J determina cuál de los dos estados ($S = 0$ o $S = 1$) se verá favorecido. Si $J > 0$ el sistema se trata de un ferromagneto que favorece un estado $S = 1$, mientras que para $J < 0$ el sistema es un antiferromagneto y el estado $S = 0$ se ve favorecido.

Es posible generalizar el Hamiltoniano de espín (Ec. 2.8) a sistemas de muchos electrones que se encuentren en átomos vecinos. Esto motiva la introducción del modelo de Heisenberg:

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.10)$$

donde $J_{i,j}$ es la constante de intercambio entre el i -ésimo y j -ésimo espín¹. En general la magnitud de estas interacciones decrecen con la distancia y el comportamiento magnético del sistema puede explicarse a partir de interacciones que involucran vecinos cercanos. Así se definen modelos con interacciones a primeros vecinos, segundos, terceros, etc. De este modo, en el modelo con interacciones a primeros vecinos son consideradas las interacciones entre un espín en un sitio dado y los vecinos en los sitios más próximos (que se encuentran a una distancia d_1) y se desprecia la interacción con los restantes. El modelo con interacciones entre vecinos de orden n involucra solo a los vecinos que se encuentran a una distancia d_n . En general tendremos el Hamiltoniano

$$\hat{H}_{EX} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_1 \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \sum_{\langle\langle\langle i,j \rangle\rangle\rangle} J_3 \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + \dots, \quad (2.11)$$

en donde los símbolos $\langle \dots \rangle$, $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ y $\langle\langle\langle \dots \rangle\rangle\rangle$, indican que las sumas se realizan sobre los primeros, segundos y terceros vecinos, que interactúan por medio de los acoplamientos J_1 , J_2 y J_3 , respectivamente.

El cálculo de las integrales de intercambio en general es complicado pero hay aspectos generales que pueden ser resaltados. En primer lugar, si los dos electrones involucrados en la integral se encuentran en el mismo átomo, la constante de intercambio en general es positiva. Como dijimos, esto estabiliza el estado triplete ($S = 1$) y asegura una parte espacial antisimétrica que minimiza la repulsión entre los electrones al favorecer una separación entre ellos.

Si dos electrones se encuentran en átomos distintos, cualquier estado conjunto será una combinación de uno centrado en uno de los átomos y el otro centrado en el otro átomo. Es importante recordar que la energía de una partícula en una caja unidimensional de longitud L es proporcional a L^{-2} ; esta energía es cinética y crece al reducir el tamaño de

¹A lo largo de la tesis también emplearemos indistintamente el término “espín” para referirnos a los momentos magnéticos. Desde el punto de vista microscópico estas dos magnitudes están relacionadas por la ecuación $\mathbf{m} = -\frac{g\mu_B}{\hbar}\mathbf{S}$, donde \mathbf{m} es el momento magnético, \mathbf{S} es un operador de espín (o momento angular total) S arbitrario, g es el factor de Landé y μ_B es el magnetón de Bohr [65].

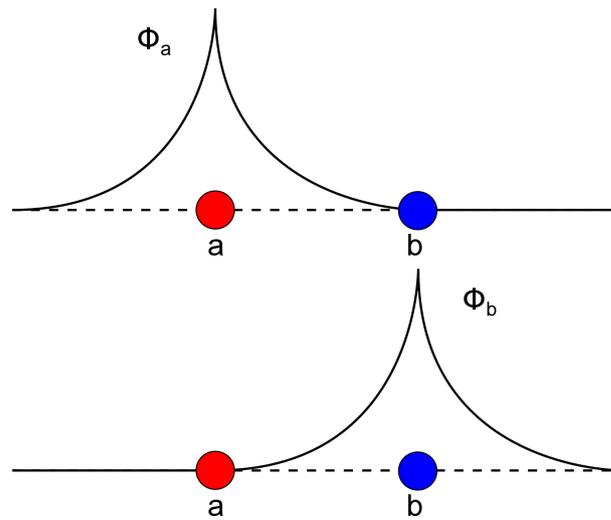


Figura 2.1: Funciones de ondas atómicas.

la caja. De modo que los electrones pueden acceder a estados de menor energía si pueden moverse entre los dos átomos (es decir, moverse en una caja más grande) en lugar de permanecer localizados en un solo átomo. Los estados que entran en juego entonces ya no son estados atómicos sino moleculares. Estos pueden ser tipo “bonding” (especialmente simétricos) o “antibonding” (especialmente antisimétricos). Los estados “antibonding” son energéticamente menos favorables ya que tienen asociada una mayor energía cinética. Por el contrario el estado espacialmente simétrico (correspondiente a un singlete de espín $S = 0$) se ve favorecido, por lo tanto la integral de intercambio resultará negativa.

2.1.2. Intercambio directo

Si la interacción entre los electrones en átomos magnéticos vecinos es de intercambio, se lo llama “intercambio directo”. Se dice que es directo porque la interacción se lleva a cabo sin la intervención de un intermediario. Sin embargo, a menudo el intercambio directo no es el mecanismo dominante en las propiedades magnéticas de los sistemas porque no existe una superposición suficientemente apreciable entre los orbitales de los átomos magnéticos vecinos. Por ejemplo, en las tierras raras los electrones $4f$ se encuentran localizados muy cerca de los núcleos y sus funciones de onda son despreciables a distancias mayores que la décima parte de la distancia interatómica. Esto significa que el intercambio directo es poco efectivo en la tierras raras. Incluso en los metales de transición, como el Fe, Co y Ni, donde los orbitales $3d$ se extienden hasta zonas alejadas del núcleo, las propiedades magnéticas de estos sistemas no pueden ser explicadas por medio de intercambio directo. Estos materiales son metales por lo que la contribución de los electrones de conducción no pueden ser despreciadas y una descripción apropiada debe considerar tanto estados localizados como estados de banda de los electrones.

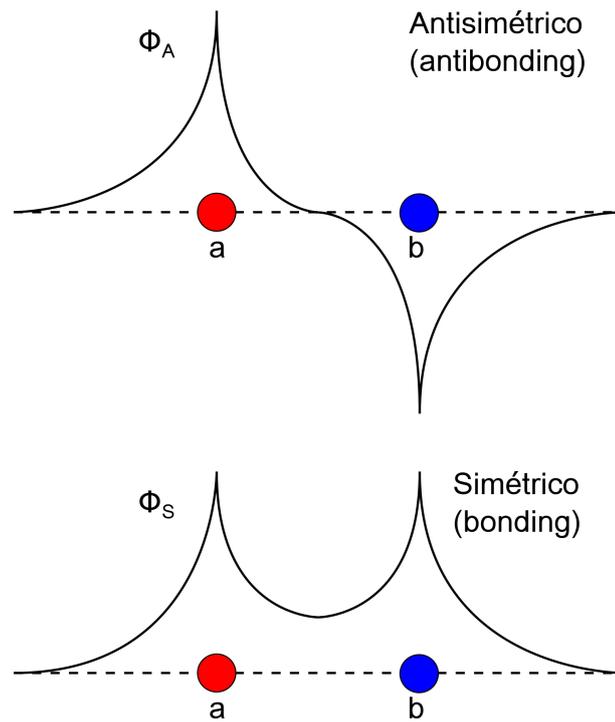


Figura 2.2: Funciones de onda simétricas y antisimétrica. Estas funciones son el punto de partida para los cálculos de las integrales de intercambio.

2.1.3. Intercambio indirecto: superintercambio

De la discusión de la sección anterior se desprende que en muchos materiales magnéticos es necesario considerar un intercambio indirecto. Una variedad de sólidos iónicos, que incluye óxidos y fluoruros, tienen estados fundamentales magnéticos. Por ejemplo MnO y MnF₂ son sistemas antiferromagnéticos, aunque no existe superposición directa entre los electrones de los iones Mn²⁺ en cada sistema, con lo que la interacción de intercambio es de corto alcance.

El mecanismo de intercambio que se presenta en estos casos es conocido como “superintercambio” [64]. Puede ser definido como una interacción de intercambio indirecto entre iones magnéticos (que no son vecinos próximos) y que es mediada por un ión no magnético (que llamaremos O) ubicado entre los dos iones anteriores (que llamaremos M). Este mecanismo surge debido a que el término de energía cinética de los electrones se puede ver favorecido dando lugar a un acoplamiento antiferromagnético. Es decir, un acoplamiento antiferromagnético reduce la energía cinética de los electrones al permitir que estos estén deslocalizados (ver Fig. 2.3).

Dado que la interacción de superintercambio involucra tanto a orbitales del ión no magnético como a los del ión magnético, se dice que es un proceso de cuarto orden y su contribución debe ser derivada a partir de correcciones (a la energía) de segundo orden en teoría de perturbaciones. Esta corrección está determinada por el parámetro t de transferencia (“hopping”) y la energía necesaria para crear un estado excitado está dada por la energía de Coulomb U . La integral de intercambio entonces consiste, en general, de dos partes: $J = J_D - \frac{t^2}{U}$. La primera de ellas (J_D) es el término que representa la

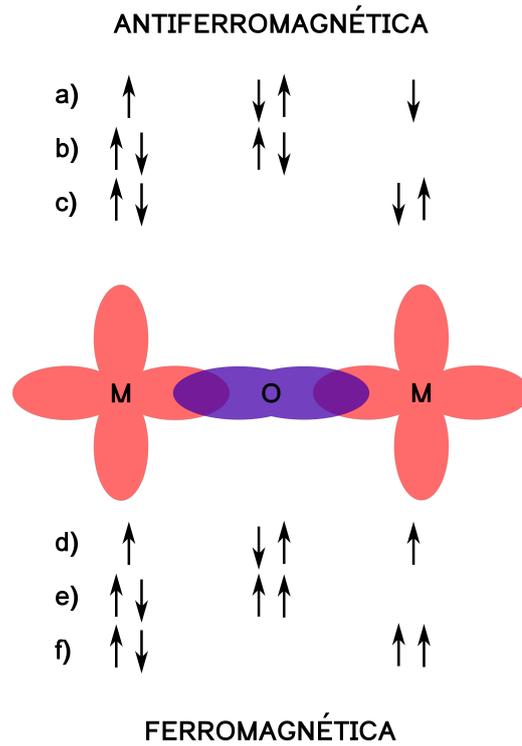


Figura 2.3: Superintercambio en un óxido magnético. Las flechas representan los espines de los cuatro electrones y cómo se distribuyen sobre los átomos del metal de transición (M) y el oxígeno (O). Suponemos que M tiene un único electrón no apareado, haciéndolo magnético. Si los momentos en los átomos del metal de transición están acoplados antiferromagnéticamente (a, b, c), el estado fundamental es (a) y este puede excitarse dando lugar a los estados (b) y (c). Los electrones por lo tanto, se puede deslocalizar sobre la estructura M-O-M, disminuyendo así su energía cinética. Si los momentos en los átomos del metal (M) están acoplados ferromagnéticamente (d, e, f), el estado fundamental es (d) y este estado no puede ser excitado a estados como (e) y (f) porque estas configuraciones están prohibidas por el principio de exclusión. La configuración ferromagnética por lo tanto cuesta más energía.

repulsión entre los electrones y favorece estados ferromagnéticos, pero es pequeña cuando los iones están muy separados. La segunda contribución ($\frac{-t^2}{U}$) proviene del término cinético y, en general, tiende a romper alineamientos paralelos de los espines [63]. Esta última contribución es la que domina en el caso de superintercambio (e introduce correcciones $\sim \frac{-t^4}{U^3}$ a la integral de intercambio [66]) y tiene el efecto que discutimos previamente. Dado que este último término resulta de la superposición entre los orbitales de los iones M y O, depende fuertemente de los ángulos entre los iones M-O-M.

Debemos mencionar que bajo ciertas circunstancias la interacción de superintercambio puede ser ferromagnética, pero esta suele ser muy débil y menos frecuente que el caso antiferromagnético.

2.1.4. Interacción de intercambio anisotrópica

Hasta aquí hemos despreciado la contribución de la interacción espín-órbita. Sin embargo es sabido que esta interacción puede desempeñar un rol similar al de un átomo de oxígeno como intermediario de la interacción de superintercambio. Aquí el estado excitado no está relacionado al átomo de oxígeno sino que es producido por la interacción de espín-órbita en un ión magnético. Existe entonces una interacción de intercambio entre el estado excitado de un ión y el estado fundamental del otro ión. Esta es conocida como una “interacción de intercambio anisotrópica” y es deducida en el contexto de una teoría de superintercambio [67–69].

Cuando esta interacción tiene lugar entre los espines \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 da origen a un término en el Hamiltoniano de espín de la forma:

$$\mathcal{H} = \mathbf{S}_1 \cdot \boldsymbol{\Gamma} \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{D} \cdot \mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2. \quad (2.12)$$

Este término tiene una contribución simétrica (representada por la matriz simétrica $\boldsymbol{\Gamma}$) y una contribución antisimétrica (representada por el término proporcional a \mathbf{D}) conocida como interacción de Dzyaloshinskii-Moriya [38, 39, 70].

Nos enfocaremos en el término de Dzyaloshinskii-Moriya (DM), que aparecerá recurrentemente en esta tesis. El vector \mathbf{D} se anula cuando el campo cristalino tiene una simetría de inversión respecto a un punto en el centro de la línea que conecta a los dos iones. Sin embargo, en general, \mathbf{D} no será nulo y su dirección estará determinada por la simetría del campo cristalino.

El acoplamiento entre dos iones en un cristal está determinado por la reglas de Moriya [39, 70]. Consideremos dos espines 1 y 2 que están ubicados en las posiciones A y B , respectivamente, y el punto de bisección de la línea AB es C . Tenemos las siguientes reglas para \mathbf{D} :

- 1 Cuando un centro de inversión se ubica en C , $\mathbf{D} = 0$.
- 2 Cuando un plano de reflexión perpendicular a AB pasa por C , $\mathbf{D} \parallel$ al plano de reflexión o $\mathbf{D} \perp AB$.
- 3 Cuando hay un plano de reflexión que contiene a A y B , $\mathbf{D} \perp$ plano de reflexión.
- 4 Cuando un eje doble de rotación perpendicular a AB pasa por C , $\mathbf{D} \perp$ al eje doble.
- 5 Cuando hay un eje n -ésimo ($n \geq 2$) a lo largo de AB , $\mathbf{D} \parallel AB$.

De esta forma, por ejemplo, si consideramos el caso en el que la interacción magnética entre dos iones vecinos (A y B) está mediada (por un mecanismo de superintercambio) por un único ión O Fig. 2.4, la orientación de $\mathbf{D}_{i,j}$ se obtiene de la relación $\mathbf{D}_{i,j} \propto \mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j = \mathbf{r}_{i,j} \times \hat{\mathbf{x}}$. Cabe mencionar que esta interacción puede ser inducida rompiendo la simetría de inversión en la superficie del sistema [71–74].

La forma de esta interacción es tal que favorece un ángulo recto entre el espín \mathbf{S}_i y el espín \mathbf{S}_j en un plano perpendicular al vector $\mathbf{D}_{i,j}$ y con una orientación que da una contribución negativa a la energía. Su efecto es entonces el de inclinar un espín respecto a

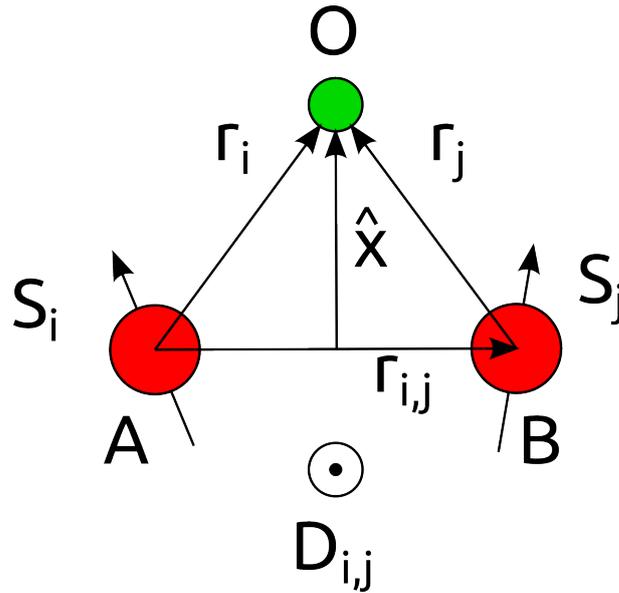


Figura 2.4: Interacción de Dzyaloshinskii-Moriya (caracterizada por el vector $\mathbf{D}_{i,j}$) entre dos espines \mathbf{S}_i y \mathbf{S}_j mediada por un ión O .

otro en un pequeño ángulo. Este efecto da lugar al fenómeno de “ferromagnetismo débil” en algunos antiferromagnetos [38].

En el caso de un arreglo de momentos magnéticos sobre sitios de una red, la generalización es [63]:

$$\hat{H}_{DM} = \sum_{i,j} \mathbf{D}_{i,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_i \times \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (2.13)$$

donde los índices i y j identifican los sitios de la red.

En referencia a la magnitud de estas últimas interacciones las podemos organizar según una jerarquía de forma que la interacción de intercambio (isotrópica) es la más fuerte, seguida por la interacción DM y finalmente la interacción anisotrópica de intercambio.

2.1.5. Frustración magnética

Existen materiales magnéticos que admiten una descripción simple en los que algunas de sus propiedades y estados de equilibrio pueden ser inferidas a partir del estudio de las interacciones entre pares (o unos pocos) iones magnéticos. Ejemplos de estos sistemas pueden ser un sistema ferromagnético y un sistema antiferromagnético en una red bipartita². Sin embargo, muchos materiales exhiben comportamientos que son considerablemente más complejos debido a la competencia de múltiples interacciones que no pueden ser satisfechas simultáneamente. Esto es generalmente clasificado como frustración magnética. El concepto de frustración fue introducido por Villain y Toulouse [75–77] a finales de los años 70 en el contexto de vidrios de espín, que marcaron el comienzo de una extensa investigación de los sistemas frustrados hasta la actualidad. Estos materiales han sido

²Se dice que una red es bipartita si cada uno de sus sitios pueden ser distinguidos por medio de dos especies (llamémoslas “A” y “B”), de tal forma que un sitio de una dada especie (digamos “A”) tiene como primeros vecinos solo sitios de la otra especie (“B”).

un tema de investigación muy activo debido a que sus propiedades diversas, entre las cuales podemos mencionar, estados fundamentales altamente degenerados, ordenamientos no colineales y novedosas transiciones de fases [78, 79], ofrecen un escenario en el cual investigar preguntas fundamentales de la física que van más allá del magnetismo en sí. En general se reconocen dos posibles causas de la frustración: 1) frustración geométrica y 2) frustración debido a interacciones competitivas.

Un caso clásico de frustración geométrica (y también uno de los más simples) es la red triangular antiferromagnética ($J > 0$) con el Hamiltoniano

$$H = J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_1\sigma_3), \quad (2.14)$$

donde los momentos magnéticos σ_i (que consideraremos variables de Ising en este ejemplo $\sigma_i = \pm 1$) se ubican en los vértices de un triángulo como se muestra en la Fig. 2.5 (a). Como cada espín puede orientarse hacia arriba o hacia abajo, hay ocho formas posibles de organizar los espines (2^3). Dos de estos son arreglos ferromagnéticos (con energía $E_F = 3J$), y los otros seis tienen dos pares antiferromagnéticos y un par ferromagnético (la energía de estas configuraciones es $E_A = -J$). De modo que no es posible tener tres pares antiferromagnéticos. Como el estado de menor energía corresponde a $E = E_A$, los seis arreglos son energéticamente equivalentes, por lo tanto el estado fundamental magnético tiene una degeneración igual a seis. Este es uno de los efectos más notables de la frustración. La extensión de este modelo a una red infinita (o de escala macroscópica) resulta en una intrigante física de baja temperatura por la alta degeneración de su estado fundamental [80]. Ejemplos adicionales de sistemas bidimensionales que presentan frustración geométrica son las redes kagomé (Fig. 2.5 (b)) y la red tipo “checkerboard” (Fig. 2.5 (c)). Las disposiciones tridimensionales que causan frustración geométrica a menudo incluyen poliedros con caras triangulares, el caso más simple es el tetraedro y arreglos de estos en una red de pyrocloro (Fig. 2.5 (d)).

Los sistemas también pueden estar magnéticamente frustrados por la existencia de múltiples interacciones que cooperan para lograr un solo estado fundamental magnético con el resultado potencial de que los espines son “congelados” en direcciones aleatorias. Esto se conoce como vidrio de espines, y la temperatura a la que se congelan a menudo se denomina temperatura de congelamiento [81]. La interacción DM que discutimos anteriormente es otro ejemplo de interacción que introduce frustración en un sistema.

2.1.6. Campo magnético externo

El comportamiento de un espín inmerso en un campo magnético (\mathbf{B}) está determinado por el término de Zeeman

$$\hat{H}_B = \sum_i \mathbf{B}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_i, \quad (2.15)$$

donde \mathbf{B}_i representa el campo magnético en el sitio i .

En una representación clásica (que discutiremos más adelante) de este problema, la energía del sistema es mínima cuando los momentos magnéticos son paralelos al campo externo. Para un campo magnético externo uniforme, esta contribución a la energía depende solo del valor medio de la magnetización.

Debemos mencionar que desde el punto de vista macroscópico y clásico del magnetis-

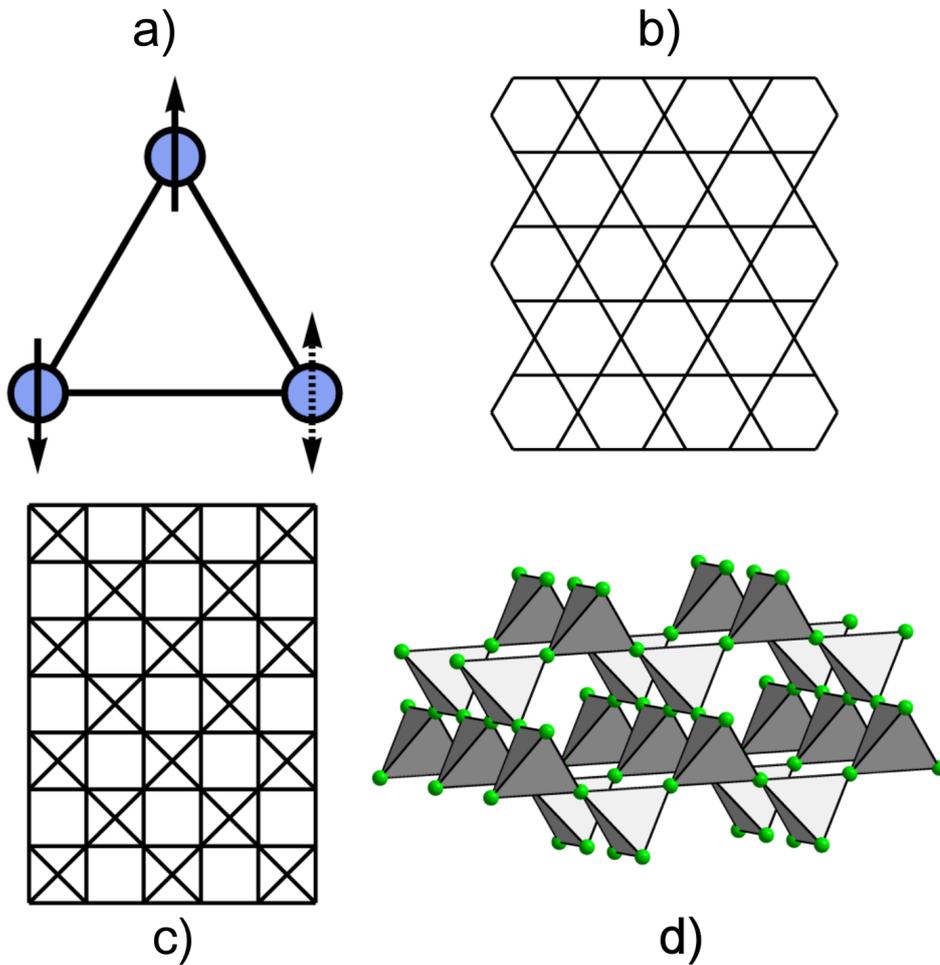


Figura 2.5: (a) Esquema que representa un sistema geoméricamente frustrado en una disposición triangular en la que la interacción entre los momentos magnéticos es antiferromagnética. La doble flecha punteada denota la incapacidad del tercer espín para seleccionar un estado una vez que se establece un par antiferromagnético. (b) Red kagomé. (c) Red “checkerboard”. (d) Red pyrocloro.

mo la energía asociada a la presencia de un campo magnético externo puede ser separada en dos partes: una debida al campo externo en sí y otra proveniente de un campo desmagnetizante. La primera parte corresponde al término de Zeeman que ya presentamos antes. La segunda parte, el término desmagnetizante, suele ser muy relevante en sistemas finitos o en los casos en los que interesa estudiar los efectos de borde. Dado que en esta tesis estudiaremos sistemas extensos, en adelante despreciaremos esta última contribución.

2.1.7. Campo eléctrico externo

Algunos materiales se comportan como multiferróicos. Esto significa que además de un orden magnético pueden presentar un orden eléctrico caracterizado por un momento eléctrico \vec{P}_i [57, 82, 83]. Su interacción con un campo eléctrico externo está dada por el

Hamiltoniano:

$$\hat{H}_E = \sum_i \mathbf{E}_i \cdot \hat{\mathbf{P}}_i. \quad (2.16)$$

En magnetos quirales³ aisladores, la presencia de una polarización eléctrica del sistema está permitida debido a que la simetría de inversión está explícitamente rota por la presencia de una interacción DM. Existe entonces un acoplamiento magnetoeléctrico, es decir, la magnetización del sistema puede inducir una polarización eléctrica y viceversa.

Una polarización eléctrica puede ser generada por medio del mecanismo de hibridización $d-p$, que resulta del acoplamiento entre un ión de un metal de transición y un ión ligante (como el oxígeno) con un único momento magnético [84–87]. Fue demostrado experimentalmente que este mecanismo tiene lugar en el óxido Cu_2OSeO_3 [88, 89].

Las polarizaciones eléctricas locales \mathbf{p}_{ij} inducidas por este mecanismo están dadas por [87]:

$$\mathbf{p}_{ij} \propto (\hat{\mathbf{e}}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i)^2 \hat{\mathbf{e}}_{ij}. \quad (2.17)$$

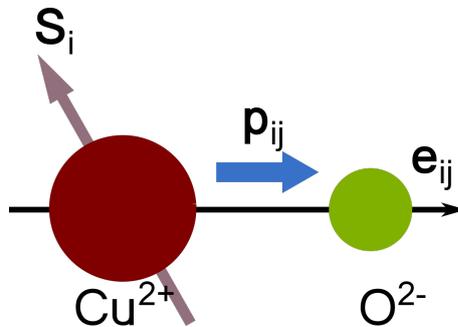


Figura 2.6: Representación esquemática del mecanismo de hibridización dependiente del espín que da origen a una polarización eléctrica inducida por un momento magnético. El vector de polarización local \mathbf{p}_{ij} emerge a lo largo del versor \mathbf{e}_{ij} que conecta al i -ésimo ión magnético Cu^{2+} y el j -ésimo ión O^{2-} . La magnitud de \mathbf{p}_{ij} depende de la orientación (relativa al director \mathbf{e}_{ij}) del espín \mathbf{S}_i .

En esta expresión i y j son índices correspondientes a los iones del metal de transición Cu^{2+} y los iones de oxígeno O^{2-} , respectivamente. En la deducción de \mathbf{p}_{ij} se supone que este momento es generado por una par de iones adyacentes de Cu^{2+} (magnético) y de O^{2-} (ligando) donde \mathbf{e}_{ij} es el versor a lo largo del enlace que conecta a ambos iones y \mathbf{S}_i es la magnetización del metal de transición, Fig. 2.6.

2.2. Modelo clásico

Si bien los modelos microscópicos para los sistemas magnéticos son cuánticos (el espín es una propiedad intrínsecamente cuántica) muchos sistemas pueden estudiarse desde un punto de vista clásico. En particular si el espín es muy grande el sistema se comportará como clásico. Si definimos los operadores $\hat{\mathbf{n}}_i = \hat{\mathbf{S}}_i / \sqrt{S(S+1)}$ ($i = x, y, z$) y recordamos

³La característica fundamental que define a un magneto como quiral es la ruptura de la simetría de inversión en el sistema y un ejemplo de esto es un sistema con interacción DM.

el álgebra de momentos angulares $[\hat{\mathbf{S}}_i, \hat{\mathbf{S}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{\mathbf{S}}_k$, los conmutadores de $\hat{\mathbf{n}}_i$ están dados por

$$[\hat{\mathbf{n}}_i, \hat{\mathbf{n}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\frac{\hat{\mathbf{n}}_k}{\sqrt{S(S+1)}}, \quad (2.18)$$

que en el límite de grandes espines ($S \rightarrow \infty$) conduce a

$$[\hat{\mathbf{n}}_i, \hat{\mathbf{n}}_j] = 0. \quad (2.19)$$

Esto significa que los operadores de espín pueden ser reemplazados por vectores \mathbf{n} de R^3 que satisfacen la condición local:

$$|\mathbf{n}| = \sum_{\alpha=1}^3 (n^\alpha)^2 = 1. \quad (2.20)$$

Este modelo puede ser extendido a sistemas de variables con dimensión (d) menor y mayor que tres (introduciendo la condición local $|\mathbf{n}| = \sum_{\alpha=1}^d (n^\alpha)^2 = 1$). Dentro de esta generalización están contenidos tres casos de gran interés: $d = 1$, *modelo de Ising*, $d = 2$, *modelo XY* y $d = 3$, *modelo de Heisenberg*. Las variables de espín que hemos considerado hasta ahora son variables estáticas pero es posible introducir dinámica en el sistema dotándolo de reglas apropiadas para la evolución temporal de los espines.

2.2.1. Orden clásico y límite del continuo

El estudio del estado fundamental del modelo clásico es relevante incluso cuando el sistema en estudio es cuántico. Por un lado los estados fundamentales definen configuraciones en torno a las cuales estudiar los efectos tanto de fluctuaciones térmicas (clásicas) como cuánticas. Por otro lado, un aspecto muy importante de dichas configuraciones, como se observará en la próxima sección y a lo largo de esta tesis, es que permiten la introducción de un espacio topológico asociado a ellas que define algunos de los rasgos fundamentales del sistema. En muchos casos estos estados son uniformes, sin embargo algunas interacciones (como es el caso de la interacción DM) pueden estabilizar estados que presentan una variación espacial, o una modulación del campo de espín, caracterizada por una longitud l mucho mayor que el parámetro de red del sistema ($l \gg a$, a parámetro de red). Por este motivo introduciremos aquí la aproximación del continuo en la cual la naturaleza discreta de la red pierde relevancia.

Si el campo de magnetizaciones es una función suave de las coordenadas, entonces podemos aproximar al espín en el sitio \mathbf{r}_j de la siguiente manera

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}_j) \approx \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) + a(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \nabla)\mathbf{S}(\mathbf{r}_i) + \frac{a^2}{2}(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \nabla)^2\mathbf{S}(\mathbf{r}_i) + \dots, \quad (2.21)$$

donde $\mathbf{S}(\mathbf{r}_i)$ es el espín en el sitio \mathbf{r}_i y $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ es el versor que apunta en la dirección del vector $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$. Si aplicamos esta aproximación al modelo de Heisenberg (Ec. 2.10) con

interacciones ferromagnéticas a primeros vecinos, tenemos

$$\mathcal{H} = -\frac{a^2 J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} [(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \nabla)^2 \mathbf{S}(\mathbf{r}_i)], \quad (2.22)$$

donde hemos descartado términos constantes. En el límite continuo consideramos $a \rightarrow 0$ y reemplazamos $a^2 \sum_i \rightarrow \int d^2 \mathbf{r}$. Para el caso de una red cuadrada entonces tenemos:

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \int [(\partial_x \mathbf{S})^2 + (\partial_y \mathbf{S})^2] d^2 \mathbf{r}. \quad (2.23)$$

A una teoría descrita por este Hamiltoniano se la llama modelo sigma no lineal [90, 91]. Este modelo aparecerá nuevamente en esta tesis cuando generalizaremos esta aproximación al estudio de sistemas antiferromagnéticos (Cap. 4 y Cap. 5) luego de introducir la noción de parámetro de orden en la próxima sección.

2.3. Topología

La topología es una rama de la matemática que estudia las propiedades de los espacios que son invariantes frente a transformaciones continuas. En esta sección desarrollaremos algunas herramientas de topología aplicadas al estudio de sistemas magnéticos. También presentaremos algunos de los diferentes tipos de solitones topológicos que existen en dichos sistemas y los invariantes topológicos utilizados en su clasificación. Pondremos especial énfasis en skyrmiones y vórtices \mathbb{Z}_2 que constituyen el tema central de esta tesis.

2.3.1. Topología en el estudio de sistemas magnéticos

Los sistemas magnéticos proveen uno de los escenarios más comunes de aplicación de las consideraciones topológicas que desarrollaremos más adelante [57]. Tradicionalmente el estudio de estos sistemas estuvo enfocado principalmente en el análisis de configuraciones en las que el campo de magnetización, o el parámetro de orden correspondiente en el caso más general, correspondía a un estado uniforme. Sin embargo, en los últimos años, los grandes avances tecnológicos han aumentado la capacidad de preparar y controlar sistemas en estados no uniformes. En particular se ha puesto un gran interés en la creación y manipulación de solitones topológicos como paredes de dominios, vórtices, monopolos o skyrmiones, entre otros, relevantes por su potencial aplicación a dispositivos tecnológicos de almacenamiento y procesamiento de información.

Antes de discutir el tipo de defectos topológicos en un sistema y sus características en detalle, es conveniente introducir aquí una idea básica de topología: decimos que dos configuraciones son topológicamente equivalentes⁴ si es posible deformar continuamente una de ellas en la otra sin tener que superar una barrera “infinita” de energía o recurrir a la naturaleza discreta de la red⁵ [92]. Las clases de configuraciones equivalentes definen

⁴Con mayor precisión, en adelante nos referiremos a configuraciones homotópicamente equivalentes.

⁵Alternativamente, se dice que dos configuraciones son topológicamente inequivalentes cuando ese tipo de transformación no es posible [92].

clases de equivalencia generalmente llamadas *sectores topológicos*.

En un sistema magnético real, las barreras de energía que separan a distintas configuraciones son claramente siempre finitas, lo que restringe la aplicación de nociones de topología por varias razones [92]. En primer lugar, las configuraciones microscópicas de espín están definidas en una red discreta de puntos, por lo tanto las descripciones del continuo, en base a las cuales se realizan consideraciones topológicas, son solo una aproximación. En segundo lugar, los sistemas experimentales son necesariamente finitos, y los defectos topológicos pueden ser removidos simplemente expulsándolos a través de los bordes de una muestra, por ejemplo, una pared de dominio puede ser removida desplazándola hacia los extremos de un cable nanométrico por medio de corrientes eléctricas. En tercer lugar los modelos elegidos para describir introducen aproximaciones que implican la elección de un tipo de parámetro de orden y la dimensionalidad del sistema. Ambos factores tienen como consecuencia que, bajo ciertas condiciones, lo que matemáticamente sería considerado como un defecto “topológico ideal” puede ser deformado o incluso desaparecer en una situación real. Por ejemplo, un sistema bidimensional de espines que presenta una fuerte anisotropía en la dirección (que llamamos z) perpendicular al plano del sistema puede ser descrito por el modelo XY ⁶ mencionado en la sección anterior (Sec. 2.2). Como se sabe, este tipo de sistemas presenta defectos topológicos conocidos como vórtices y están asociados a la presencia de un primer grupo de homotopía, no trivial, del parámetro de orden, $\pi_1(S^1) \approx \mathbb{Z}$. Si la anisotropía es débil el modelo que describe al sistema corresponde a un modelo de Heisenberg y el primer grupo de homotopía es trivial $\pi_1(S^2) \approx 0$, por lo cual los vórtices anteriores no existen como defectos estables. No obstante, el empleo de nociones topológicas en la clasificación de las distintas configuraciones es indispensable para explicar la gran estabilidad asociada a los solitones [90]. Entonces el problema consiste, en general, en encontrar las configuraciones estables (o metaestables) del sistema minimizando la energía (o acción) dentro de un sector topológico particular.

2.3.2. Equivalencia topológica e invariantes

El estudio de las propiedades de los espacios topológicos que son invariantes frente a transformaciones continuas permite la introducción de la noción de equivalencia topológica entre espacios. Un tipo de equivalencia es la de *homeomorfismo*. Sean X e Y dos espacios topológicos, una función $f : X \rightarrow Y$ se dice que es un *homeomorfismo* si f es biyectiva (es decir uno a uno y suryectiva), continua y tiene una función inversa f^{-1} también continua. Cuando esta función existe, se dice que los espacios X e Y son *homeomorfos*. Por ejemplo, un poliedro (K) y la superficie de una esfera (S) son espacios homeomorfos (Fig. 2.7), al igual que lo son la cara lateral de un cilindro (C) y un anillo (A) (Fig. 2.8).

Entonces surge la siguiente pregunta: ¿cómo se pueden caracterizar las distintas clases de equivalencia un de homeomorfismo? De hecho, no existe aún una respuesta completa a esta pregunta. En cambio, es posible afirmar que si dos espacios tienen diferentes *invariantes topológicos*, entonces no son homeomorfos. Aquí entendemos por invariantes topológicos a aquellas cantidades que son conservadas por homeomorfismos. Si conociéramos el conjunto completo de invariantes topológicos podríamos identificar unívocamente

⁶Para que un sistema pueda ser descrito de esta manera, es necesario que la anisotropía en consideración favorezca configuraciones planares. En este caso se dice que la anisotropía es “easy-plane”.

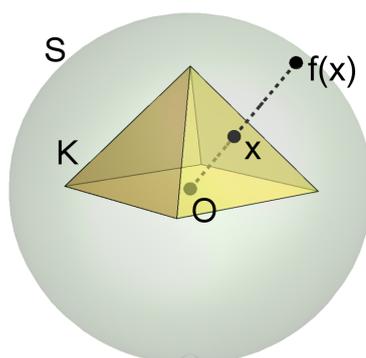


Figura 2.7: Mapeo continuo del poliedro regular K en la esfera S .

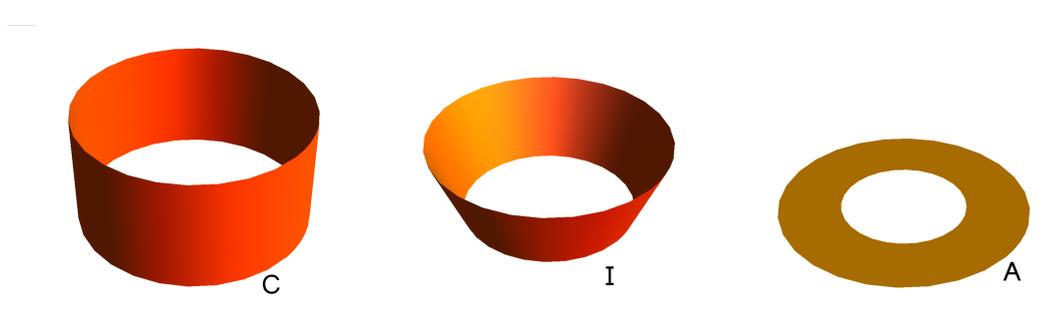


Figura 2.8: Mapeo continuo de un cilindro C de altura finita, del que se excluyen las "tapas" circulares, al anillo A , pasando por el sector cónico I .

las distintas clases de equivalencia por medio de ellos. Sin embargo, solo son conocidos un cierto conjunto de invariantes topológicos, lo que implica que incluso si todos estos últimos coinciden para dos espacios topológicos, podrían aun no ser homeomorfos entre sí. Por este motivo es que podemos afirmar, en el mejor de los casos, que si dos espacios topológicos tienen diferentes invariantes topológicos no pueden ser homeomorfos entre sí.

Distinguir dos espacios topológicos requiere entonces de la definición y el cálculo precisos de estos invariantes. Hay dos familias de invariantes de particular importancia [93, 94]:

- 1 Grupos de homología y cohomología: denotados por H_n y H^n , respectivamente, con $n \geq 0$. Estos grupos son siempre abelianos.
- 2 Grupos de homotopía: $\pi_n(X)$ para $n \geq 1$. Para $n = 1$, $\pi_1(X)$ es llamado grupo fundamental y en general es no abeliano. Para $n \geq 2$, el grupo $\pi_n(X)$ es abeliano.

Si bien el cálculo de los grupos de homología y cohomología suele ser más sencillo que el cálculo de los grupos de homotopía (especialmente cuando $n \geq 2$), la definición de estos últimos es más sencilla que la de los primeros. Por este motivo (y otros que quedarán claros en las siguientes secciones) realizaremos una introducción breve al estudio de los grupos de homotopía.

2.3.3. Teoría de homotopía: grupos de homotopía

Homotopía es un tipo de equivalencia topológica entre espacios. Supongamos que las funciones f y g son mapas entre los espacios X e Y , $f, g : X \rightarrow Y$. Si existe un mapa $F : X \times I \rightarrow Y$ (donde I es el intervalo real $[0, 1]$), tal que $F(x, 0) = f(x)$ y $F(x, 1) = g(x)$ para cualquier punto $x \in X$, entonces se dice que f es homotópico a g . Es importante notar que aunque la definición de homomorfismo es similar a la de homotopía, en el último caso las condiciones sobre f y g son menores ya que no se requiere que tengan inversa. Por ejemplo, si tomamos $X = (0, 1)$ y $Y = \{0\}$, y sean $f : X \rightarrow Y$, $f(x) = 0$ y $g : Y \rightarrow X$, $g(0) = \frac{1}{2}$. Entonces $f \circ g = ID_Y$, mientras que $g \circ f \neq ID_X$ (ID_X e ID_Y son las funciones identidad en los espacios X e Y , respectivamente). Esto muestra que el intervalo abierto $(0, 1)$ y el punto $\{0\}$ son homotópicos, aunque no son espacios homeomorfos.

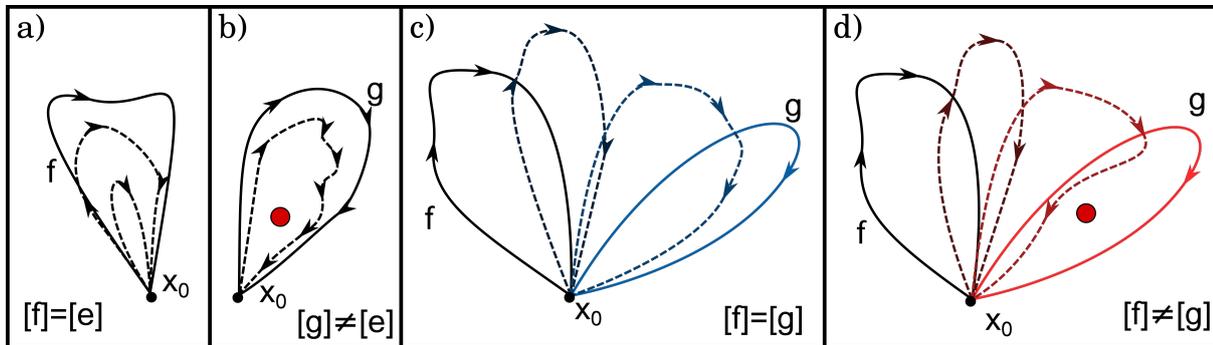


Figura 2.9: Ejemplos de homotopías. (a) Un lazo f es homotópicamente nulo si puede ser deformado continuamente en un punto como es representado con los trazos punteados. El lazo f es homotópicamente equivalente a la identidad e . (b) Si el espacio topológico X no es simplemente conexo, como se indica con el círculo rojo, entonces existe un lazo g que no puede ser deformado continuamente en la identidad e . (c) Dos loops f (trazo negro) y g (trazo celeste) son homotópicos si pueden ser deformados continuamente uno en el otro como se indica con los trazos punteados. (d) Si el espacio topológico X no es simplemente conexo, entonces existen loops f (trazo negro) y g (trazo rojo) que no son homotópicamente equivalentes.

Es sencillo entender el concepto de homotopía si consideramos mapeos de la esfera S^1 en un espacio X ($f : S^1 \rightarrow X$), que supondremos comienzan y terminan en un punto base $x_0 \in X$, por lo que f representa un lazo. Como se muestra en la Fig. 2.9 (a) para $X = \mathbb{R}^2$, si un lazo f puede ser contraído a un punto, lo llamaremos lazo nulo o identidad. Como se muestra en la Fig. 2.9 (b), esto no siempre es posible si el espacio X no es simplemente conexo, por ejemplo para $X = \mathbb{R}^2 - \{0\}$. Dos lazos f y g son homotópicos (lo notaremos como $f \simeq g$) si pueden ser deformados continuamente uno en el otro como muestra la Fig. 2.9 (c). Esta deformación no es siempre posible como se muestra en la Fig. 2.9 (d) para espacios que no son simplemente conexos (como en el caso $X = \mathbb{R}^2 - \{0\}$).

Dado que una homotopía establece una relación de equivalencia, el conjunto de los lazos en el espacio X puede ser dividido en subespacios disjuntos llamados *clases de homotopía*. La clase de equivalencia asociada a un lazo f en general se denota como $[f]$. En la Fig. 2.9 (c), los lazos f y g son homotópicos ($f \simeq g$) por lo tanto ambos pertenecen

a la misma clase de equivalencia $[f] = [g]$. Un lazo f nulo es denotado como $[f] = [e]$, donde e denota la identidad. En la Fig. 2.9 (d), el espacio X no es simplemente conexo, y los dos lazos f y g son homotópicamente inequivalentes y por lo tanto $[f] \neq [g]$.

2.3.3.1. Grupo Fundamental

Podemos dar una estructura de grupo al conjunto de lazos si definimos apropiadamente una operación entre ellos. Dos lazos f y g con el mismo punto base x_0 pueden ser unidos o concatenados para formar un nuevo lazo, $f \circ g$, que tiene el mismo punto base y es definido como el lazo que se obtiene de recorrer primero el lazo f y luego el lazo g como se ilustra en la Fig. 2.10. Esta operación puede ser utilizada para definir la operación de composición entre elementos de diferentes clases de homotopía de la siguiente manera: $[f] \circ [g] \equiv [f \circ g]$. Con esta operación, el conjunto de clases de homotopía adquiere una estructura de grupo y se lo llama *grupo de homotopía*. Para mapeos $f : S^1 \rightarrow X$, a este grupo se lo llama *primer grupo de homotopía* o *grupo fundamental* $\pi_1(X, x_0)$ de X con base en el punto x_0 . Es importante notar que el grupo fundamental puede ser abeliano o no abeliano. Si bien estaremos interesados en grupos abelianos, un grupo fundamental no abeliano puede encontrarse aun en situaciones muy simples como por ejemplo en el caso del plano con dos de los puntos removidos $X = \mathbb{R}^2 - \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\}$ (ver Fig. 2.11 (c)).

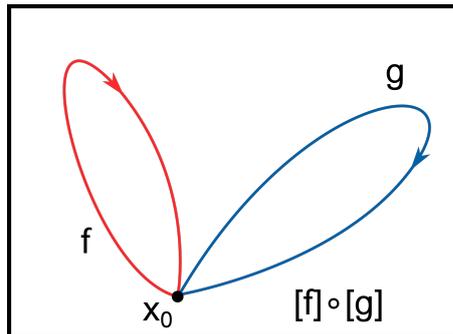


Figura 2.10: Concatenación $[f] \circ [g]$ de dos loops f y g es obtenida atravesando primero el loop f , luego el loop g , con f y g definidos como en la Fig. 2.9 (c).

Hasta aquí hemos considerado lazos que comienzan y terminan en el punto base x_0 . Sin embargo, para hacer contacto con el tema central de esta sección, la clasificación de defectos topológicos, estamos interesados en contornos que pueden ser desplazados libremente o bien mapeos sin referencia a un punto base. Esto sirve como motivación para la introducción de homotopías “libres” constituida por el conjunto de los lazos sin un punto base. De hecho, para grupos $\pi_1(X, x_0)$ abelianos, que incluye todos los casos que nos interesarán en el futuro, es posible construir un isomorfismo entre grupos fundamentales definidos en diferentes puntos base x_0 y y_0 , es decir, $\pi_1(X, x_0) \cong \pi_1(X, y_0)$ (ver Fig. 2.11 (a)). Por lo tanto, para el caso abeliano, todos los grupos fundamentales con base son isomorfos entre sí e isomorfos a un grupo fundamental abstracto que definiremos $\pi_1(X)$. Con mayor precisión diremos que si $\pi_1(X)$ es abeliano, entonces existe una correspondencia uno a uno entre elementos del grupo fundamental y las clases de lazos libremente homotópicos (sin un punto base). En el caso no abeliano, existe una correspondencia entre

clases de conjugación del grupo fundamental y los lazos libremente homotópicos como se representa en la Fig. 2.11 (b)-(d).

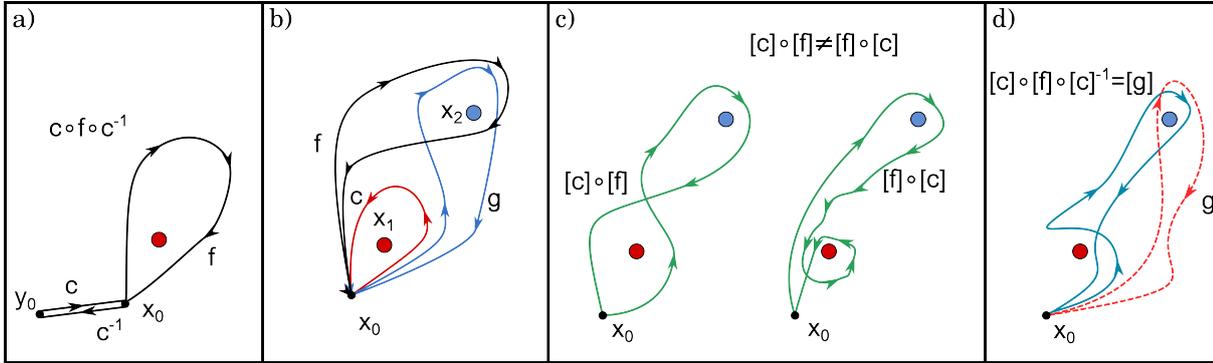


Figura 2.11: Homotopías libres y grupos de homotopía no Abelianos. (a) Para un grupo fundamental Abeliano, existe un isomorfismo trivial que conecta los grupos fundamentales con diferentes puntos base, es decir, $\pi_1(X, x_0) \simeq \pi_1(X, y_0)$. (b) Ejemplos de loops para el espacio (no simplemente conexo) $X = \mathbb{R}^2 - \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\}$ que no son homotópicos con respecto al punto base x_0 . Sin embargo, f y g son libremente homotópicos. (c) Ejemplo en el que se ilustra la naturaleza no Abeliana de $\pi_1(X, x_0)$. (d) Para un grupo fundamental no Abeliano, los lazos f y g , libremente homotópicos, son conjugados por medio de un elemento c , es decir, pertenecen la misma clase de conjugación.

2.3.3.2. Grupos de homotopía mayores

Podemos generalizar la noción de grupo de homotopía a espacios generales. En particular nos interesa definir:

$$\pi_n(X) = \{\text{Mapeos: } S^n \rightarrow X\} / \text{Bajo deformaciones continuas}, \quad (2.24)$$

siguiendo las ideas empleadas en la definición del grupo fundamental [93]. Para ello introducimos las siguientes definiciones:

- 1 Un espacio con base es un par (X, x_0) donde X es un espacio topológico y $x_0 \in X$. (En lo siguiente omitiremos el punto base x_0 y representaremos con X al espacio con base (X, x_0)).
- 2 Un mapeo con base entre espacios (con base) $X \rightarrow Y$ es una función continua $f : X \rightarrow Y$ tal que $f(x_0) = y_0$.
- 3 Homotopías entre espacios: supongamos que f y g son dos mapeos con base de $X \rightarrow Y$. Una homotopía de f a g es una función continua $H : X \times I \rightarrow Y$ tal que $H(x, 0) = f(x)$ y $H(x, 1) = g(x)$ y cada una de las funciones $H_t(x) = H(x, t)$ es un mapa con base. Para esta relación usamos la notación que introdujimos antes $f \simeq g$.

Con el corchete $[X, Y]$ denotaremos las diferentes clases de homotopía entre los espacios con base X e Y . Para definir π_n debemos recordar que S^n es el espacio de los vectores unitarios de \mathbb{R}^{n+1} . Fijamos un punto base en S^n para tener un espacio con base. Definimos

entonces $\pi_n(X) = [S^n, X]$ donde X es un espacio con base. Podemos proceder de forma análoga al del caso π_1 e introducir una operación entre los elementos de π_n . Dados dos mapas $f, g : S^n \rightarrow X$, podemos definir la composición $f \circ g : S^n \rightarrow X$ (ver Fig. 2.12) y, a partir de esta, el producto entre las clases de homotopía $[f] \circ [g] \equiv [f \circ g]$ y extender la definición considerando las clases libremente homotópicas.

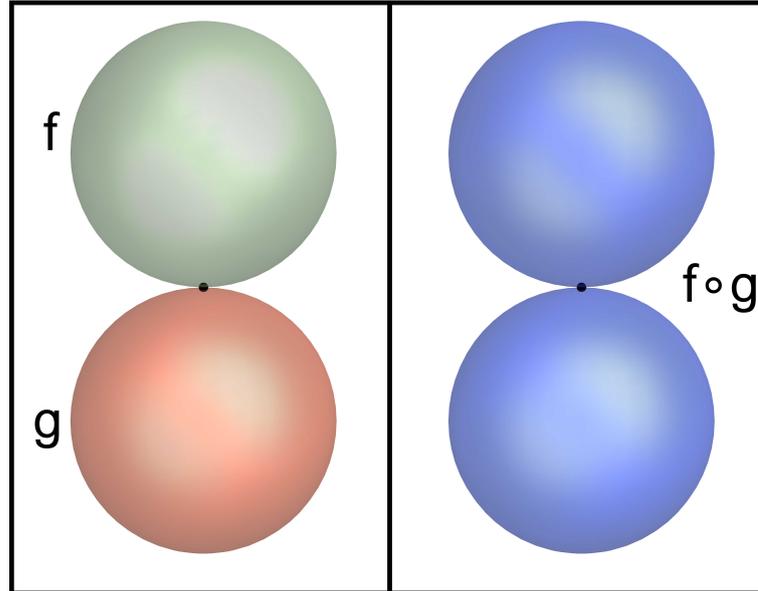


Figura 2.12: Composición de mapeos f y g desde la esfera S^n en el espacio X .

Finalizamos esta sección con un conjunto de resultados sobre grupos de homotopía de la esfera S^n y el espacio proyectivo real $\mathbb{R}P^n$ [94], que serán empleados oportunamente en el desarrollo de esta tesis:

$$\pi_k(S^n) \cong 0 \text{ para } k < n,$$

$$\pi_n(S^n) \cong \mathbb{Z},$$

$$\pi_1(\mathbb{R}P^n) \cong \mathbb{Z}_2,$$

$$\pi_k(\mathbb{R}P^n) \cong \pi_k(S^n) \text{ para } k \geq 2.$$

2.3.4. Clasificación de defectos topológicos

Un medio ordenado puede ser considerado como una región R del espacio descripta por una función $M(\mathbf{r})$ que asigna a cada punto de R un parámetro de orden. El conjunto de los valores posibles del parámetro de orden definen una variedad T . Se dice que el medio es uniforme si la función $M(\mathbf{r})$ es constante en R . Estaremos interesados en medios no uniformes que presentan configuraciones solitónicas. En estos medios el parámetro de orden varía continuamente excepto, quizá, en puntos aislados, líneas o superficies. Estas regiones singulares de menor dimensión que R las llamaremos *defectos*.

La teoría de homotopía es una herramienta fundamental para la descripción y clasificación de solitones topológicos y defectos en una extensa variedad de sistemas ordenados [95]. Para los casos que consideraremos en esta tesis, los defectos topológicos pueden existir cuando los mapeos del espacio S^n en el espacio del parámetro de orden X no pueden ser contraídos a un único punto, esto requiere que $\pi_n(X) \not\cong 0$ para algún valor de n . Como consecuencia de esto, los solitones topológicos están caracterizados por la clase de homotopía a la que pertenecen. Es importante, entonces, disponer de una herramienta que permita identificar configuraciones que pertenecen a la misma clase de homotopía. Esto motiva la introducción de invariantes de clase que están definidos por medio de operaciones sobre los mapeos particulares y toman un valor específico para cada clase de homotopía. En lo que resta de esta sección ilustraremos cómo se emplea la teoría de homotopía para clasificar defectos que serán de nuestro interés y mencionaremos algunos de los invariantes de clase que serán útiles.

2.3.5. Vórtices

Consideremos espines planares $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ (vectores unitarios de \mathbb{R}^2) en un sistema bidimensional como se ilustra en la Fig. 2.13. Supongamos que el campo $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ es continuo en todo el plano excepto en un punto singular P y consideremos un círculo C_P centrado en P , por lo tanto la función $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ con $\mathbf{r} \in C_P$ representa un círculo. Cualquier valor posible de $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ puede ser especificado por un ángulo que corresponde a un determinado punto del espacio del parámetro de orden, en este caso representado por un círculo (ver Fig. 2.15). Como resultado de esto podemos contar el número de veces que recorremos el círculo (espacio del parámetro de orden) cuando completamos una vuelta alrededor del círculo en el espacio real. Este número, que se lo llama “*winding number*”, es entero. Puede ser calculado si consideramos una trayectoria cerrada (en el espacio real \mathbb{R}^2) parametrizada por una variable $t \in [0, 1]$ ($\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(1)$) y a partir de ella definimos la función $f(t) = \theta(\mathbf{r}(t))$, donde θ es el ángulo en el espacio del parámetro de orden asociado al espín en la posición $\mathbf{r}(t)$, por medio de la integral [90]:

$$n = \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \frac{df}{dt} dt, \quad (2.25)$$

$$n \in \mathbb{Z}. \quad (2.26)$$

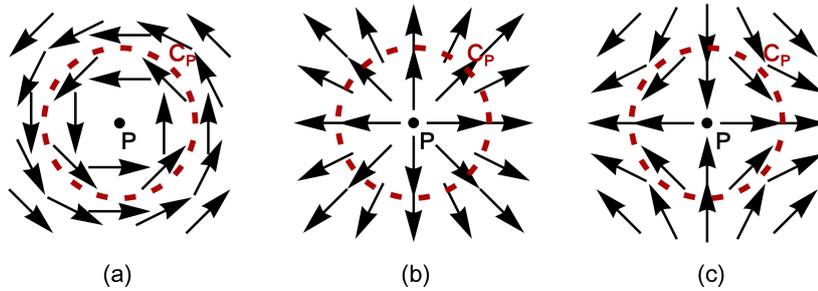


Figura 2.13: Espines planares en un espacio bidimensional, con windings: (a) $n = +1$, (b) $n = +1$ y (c) $n = -1$.

El hecho de que este número sea entero se debe a que $\pi_1(S^1) \simeq \mathbb{Z}$ y se trata de un invariante topológico que no cambia frente a transformaciones de homotopía. Esto es, una configuración con un winding number n puede ser deformado continuamente en otra configuración con el mismo winding number, pero dos mapeos con windings diferentes no pueden ser transformados continuamente entre sí. En la Fig. 2.14, el winding de las singularidades es distinto de cero, lo que significa que estas singularidades son topológicamente estables, y no pueden ser removidas continuamente sin afectar la continuidad en la región alejada del defecto, tampoco pueden ser eliminadas por fluctuaciones locales en la configuración.

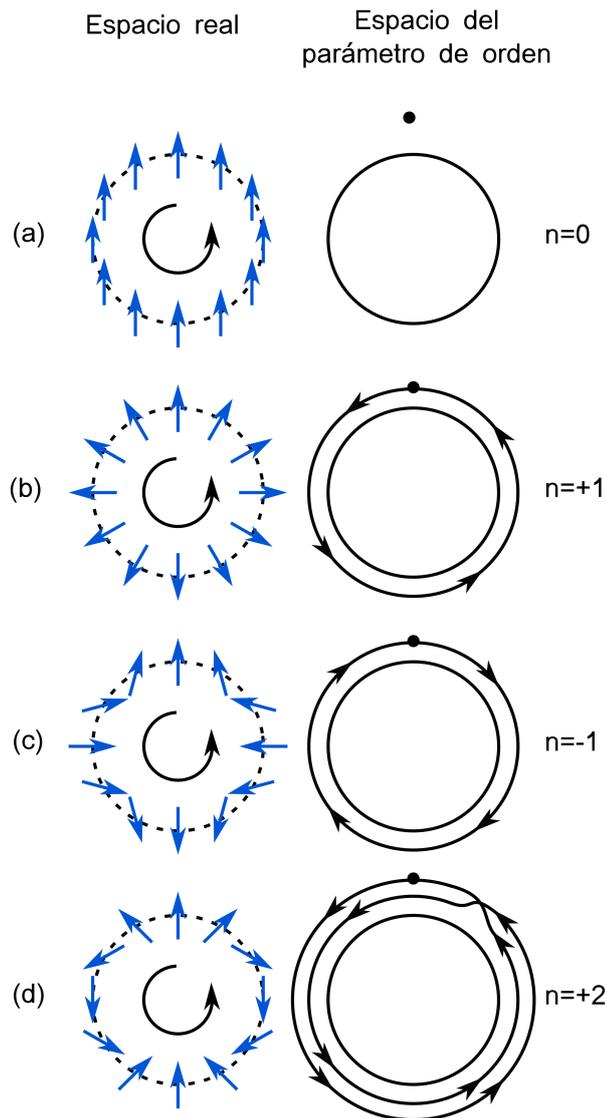


Figura 2.14: Configuraciones de espín $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ sobre círculos (izquierda) y el mapeo de $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ sobre el espacio del parámetro de orden (derecha). (a) Los espines son uniformes y por lo tanto mapeados en un lazo trivial (en este caso corresponde a un punto). (b)-(d) Los espines son no uniformes con windings $+1$, -1 , y $+2$ respectivamente.

Un par de vórtices puede ser transformado en una configuración cuyo winding es igual a la suma de los windings de cada uno de los vórtices. En el caso representado en la

Fig. 2.15 un par de vórtices con windings opuestos es equivalente a una configuración no singular, por medio de la cual pueden ser removidas las singularidades sin alterar el campo del parámetro de orden en puntos distantes respecto del vórtice. Por ejemplo, acercando un vórtice con winding opuesto desde el infinito es posible eliminar un defecto estable.

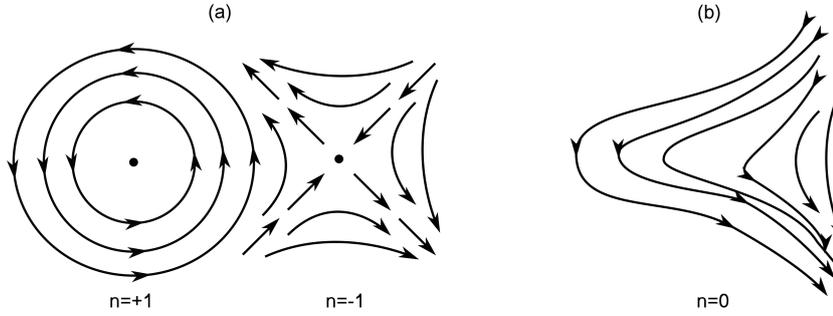


Figura 2.15: (a) Dos defectos ($n = +1$ y $n = -1$) de un campo de espines planares. (b) Configuración no singular equivalente a la representada en a).

2.3.6. Skyrmiones

Si en lugar de espines planares tenemos espines de \mathbb{R}^3 unimodulares, el parámetro de orden corresponde a una superficie esférica en lugar de un círculo. Por lo tanto el “winding number”, en este caso también llamado “carga topológica” o “número de skyrmión”, de una textura magnética topológica, es definida como

$$\mathcal{Q} = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{S} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial y} \right) d^2 \mathbf{r}, \quad (2.27)$$

$$\mathcal{Q} \in \mathbb{Z}. \quad (2.28)$$

Si usamos coordenadas polares $\mathbf{r} = (r \cos[\varphi], r \sin[\varphi])$ para representar los puntos del plano y coordenadas esféricas para una configuración de espín con simetría radial, $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ puede ser expresado como:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = (\cos[\phi(\varphi)] \sin[\theta(r)], \sin[\phi(\varphi)] \sin[\theta(r)], \cos[\theta(r)]). \quad (2.29)$$

Para esta configuración la carga topológica resulta

$$\mathcal{Q} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} f_\varphi \frac{d\theta(r)}{dr} \frac{d\phi(\varphi)}{d\varphi} \sin(\theta(r)) = \frac{1}{4\pi} \cos \theta(r) \Big|_{r=0}^{r=\infty} \phi(\varphi) \Big|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}. \quad (2.30)$$

La carga topológica indica el número de veces que la configuración de espín cubre la esfera S^2 correspondiente al espacio del parámetro de orden. Dado que $\phi(\varphi)$ debe ser una función monovaluada, tenemos que si $\phi(0) = \phi_0$ entonces $\phi(2\pi) = \phi_0 + 2\pi m$, donde m es un entero. Si θ satisface las condiciones $\theta(0) = \pi$ y $\theta(\infty) = 0$ (condiciones propias de un skyrmión), entonces $\mathcal{Q} = m$.

2.3.7. Vórtices \mathbb{Z}_2

Existen en la naturaleza sistemas que requieren de parámetros de orden considerablemente más complejos que los dos casos discutidos en las secciones previas. En esta sección nos enfocaremos en un parámetro de orden que corresponde a una matriz de $SO(3)$. Como un primer ejemplo, comenzaremos describiendo el ${}^3\text{He}$ y el tipo de defectos que se pueden identificar en este sistema, para luego discutir un sistema análogo (también descrito por un parámetro de orden $SO(3)$) en el contexto de magnetismo: el antiferromagneto de Heisenberg en una red triangular.

2.3.7.1. Superfluido ${}^3\text{He}$: fase A de dipolo bloqueado

En la fase A del ${}^3\text{He}$ el parámetro de orden toma la forma [94, 95]:

$$A_{\mu i} = d_{\mu}(\Delta_1 + i\Delta_2)_i, \quad (2.31)$$

donde $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^3$ es un vector unimodular y (Δ_1, Δ_2) es un par de vectores ortonormales de \mathbb{R}^3 . El vector \mathbf{d} toma valores en S^2 . Si definimos $\mathbf{l} \equiv \Delta_1 \times \Delta_2$, la terna $(\Delta_1, \Delta_2, \mathbf{l})$ forman un sistema de ejes ortonormales en cada punto del medio. Dado que cualquier sistema ortogonal puede ser obtenido a partir de un sistema particular $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ por medio de la aplicación de una matriz de rotación de vectores tridimensionales, concluimos que el parámetro de orden del ${}^3\text{He}$ -A es $S^2 \times SO(3)$. Si el vector \mathbf{d} varía en el espacio, el parámetro de orden en la Ec. 2.31 describe lo que se conoce como la “fase A de dipolo libre” del ${}^3\text{He}$ [95]. Sin embargo, debido a la presencia de fuerzas dipolares el vector \mathbf{d} es forzado a permanecer a lo largo de la dirección \mathbf{l} , lo que da lugar a lo que se conoce como la “fase A de dipolo bloqueado”. Por lo tanto, en esta fase, el parámetro de orden se reduce a $SO(3)$ correspondiente a transformaciones del triedro $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ al triedro $(\Delta_1, \Delta_2, \mathbf{l})$ por medio de un elemento $g \in SO(3)$,

$$g : (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) \rightarrow (\Delta_1, \Delta_2, \mathbf{l}). \quad (2.32)$$

Dado que g depende de las coordenadas del espacio \mathbf{r} , la configuración $(\Delta_1(\mathbf{r}), \Delta_2(\mathbf{r}), \mathbf{l}(\mathbf{r}))$ define un mapa $f : X \rightarrow SO(3)$. Por lo tanto los grupos de homotopía relevantes para clasificar defectos en la fase ${}^3\text{He}$ -A son $\pi_n(SO(3))$.

En particular estaremos interesados en sistemas bidimensionales por lo que los grupos de homotopía que consideraremos serán π_1 y π_2 . Dado que el grupo $SO(3)$ es isomorfo al espacio $\mathbb{R}P^3$ ($SO(3) \cong \mathbb{R}P^3$) [94, 95] tenemos que $\pi_n(SO(3)) \cong \pi_n(\mathbb{R}P^3)$. Puesto que $\pi_2(\mathbb{R}P^3) \cong \{0\}$, no existen defectos asociados a este grupo de homotopía. Sin embargo $\pi_1(\mathbb{R}P^3) \cong \{0, 1\} \cong \mathbb{Z}_2$ (ver Sec. 2.3.3.2) por lo tanto existen defectos puntuales. Configuraciones que pertenecen a la clase identificada con 0 pueden ser deformadas continuamente en la configuración uniforme y se la llama configuración trivial, mientras que aquellas que pertenecen a las clase 1 son identificadas con los defectos, Fig. 2.16 (a)-(c). Una propiedad importante de \mathbb{Z}_2 es que $1 + 1 = 0$, por lo tanto la combinación de dos defectos resulta en una configuración que es deformable con continuidad a la configuración trivial. Combinando dos defectos podemos construir una configuración que tiene aspecto de vórtice pero sin ser singular. Como se puede verificar en la Fig. 2.16 (d) la imagen del lazo α recorre $\mathbb{R}P^3$ dos veces, mientras que la del lazo más pequeño β puede ser contraído a un

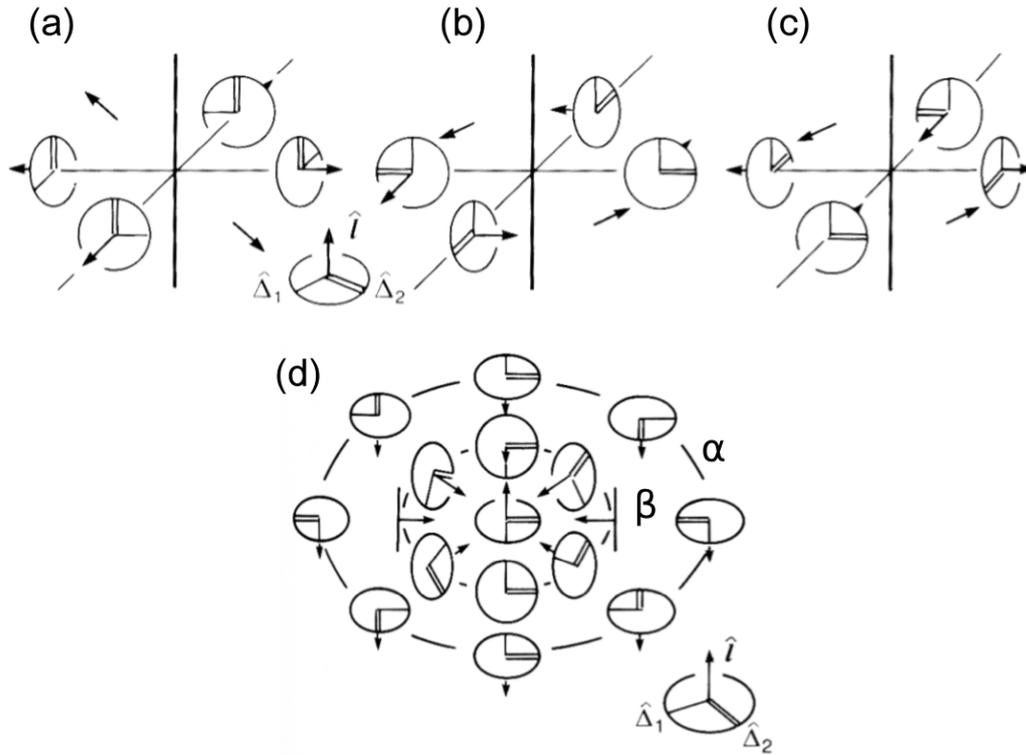


Figura 2.16: (a)-(c) Defectos topológicos (pertenecientes a la clase “1”), (d) Configuración no singular (perteneciente a la clase “0”). Es posible transformar la imagen del lazo α en la imagen del lazo β por medio de una rotación de la primera en $\pi/2$ a lo largo del eje $\hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{r}}$. A su vez, la imagen del lazo β puede ser transformada en la configuración representada en el centro nuevamente por una rotación en $\pi/2$ alrededor del eje $\hat{\mathbf{e}}$ (figura extraída de Ref. [94]).

punto.

2.3.7.2. Antiferromagneto de Heisenberg en una red triangular

Para el modelo de Heisenberg

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.33)$$

con interacciones antiferromagnéticas ($J > 0$) a primeros vecinos, sobre una red triangular, el sistema tiene, a $T = 0$, tiene un orden uniforme en el que el espín en cada una de las subredes forma un ángulo de 120° con los espines de las otras dos subredes [96], Fig. 2.17 (a). Podemos separar el sistema en un conjunto de plaquetas triangulares en el que cada una de ellas contiene a un único espín de cada especie, Fig. 2.17 (b). Las posibles excitaciones corresponden a rotaciones, que dependen de la posición, de la estructura 120° [97]. Por lo tanto el parámetro de orden lo identificamos con una matriz de $SO(3)$. Para un sistema bidimensional, entonces, esperamos la misma clase de defectos que en el caso de la fase A del ^3He que discutimos previamente. En este caso la matriz $SO(3)$ representa

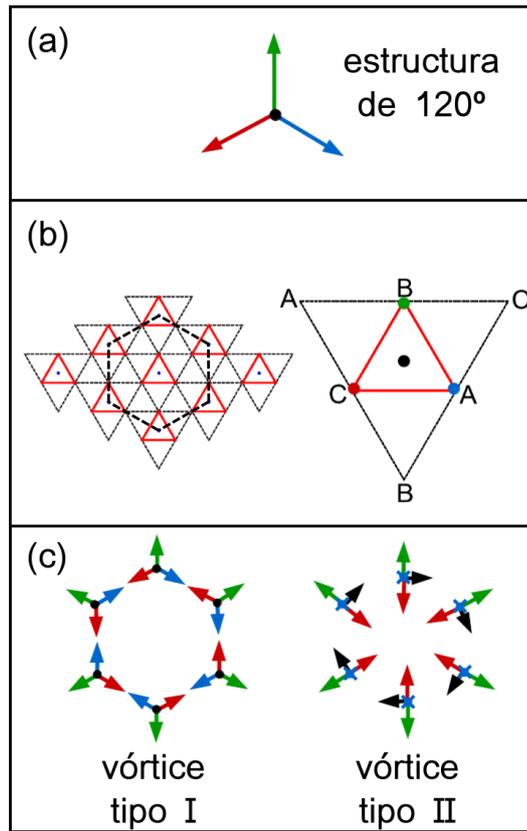


Figura 2.17: Estructura magnética de la red triangular antiferromagnética. Las flechas de colores, azul, verde y rojo, representan al espín de las subredes A, B y C, respectivamente. La flecha negra representa al vector quiralidad definido como $\boldsymbol{\kappa} = \frac{2}{3\sqrt{3}}(\mathbf{S}_A \times \mathbf{S}_B + \mathbf{S}_B \times \mathbf{S}_C + \mathbf{S}_C \times \mathbf{S}_A)$. (a) Configuración de 120° formada por un espín de cada especie. (b) Descomposición de la red triangular en plaquetas triangulares (triángulos rojos), cada una de las cuales contiene solo un espín de cada una de las subredes A, B y C. (c) Ejemplo de configuraciones singulares al recorrer el hexágono representado en (b): por medio de una rotación en $\pi/2$ a lo largo de la dirección radial es posible transformar el vórtice tipo I en uno tipo II. En el vórtice tipo I el vector quiralidad (punto negro) apunta en la dirección saliente del plano de representación, en el vórtice tipo II el espín de la subred A apunta en la dirección entrante (cruz azul).

distintas orientaciones de la estructura de 120° y entre las posibles configuraciones singulares, que llamaremos vórtices \mathbb{Z}_2 , se encuentran las que ilustramos en la Fig. 2.17 (c). Si bien ambas son configuraciones topológicamente equivalentes, la energía de cada una de ellas es diferente, motivo por el cual las distinguimos como vórtice tipo I y vórtice tipo II [44, 96].

Podemos asignar una matriz de $SU(2)$ única [44] (esta representación es de dos a uno, dos elementos de $SU(2)$ corresponden al mismo elemento de $SO(3)$) a cada matriz de $SO(3)$ a lo largo de la línea que conecta dos puntos adyacentes de la red de plaquetas. Llamamos \mathbf{U}_i a la matriz asociada con la i -ésima línea que conecta dos plaquetas adyacentes. La vorticidad \mathcal{V}_C para una trayectoria cerrada C (como el hexágono representado en la Fig.

2.17 (b)) se define como

$$\mathcal{V}_C = \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \prod_{i \in C} \mathbf{U}_i \right\}, \quad (2.34)$$

con esta definición la vorticidad toma el valor $\mathcal{V}_C = 1$ para una configuración trivial y $\mathcal{V}_C = -1$ para un lazo que encierra un vórtice.

Capítulo 3

Skyrmiones en sistemas ferromagnéticos

“—¡Qué desgracia, Dios mío! —dice—. Acabo de matar a mi antiguo amo, a mi amigo, a mi cuñado; yo que soy el mejor hombre del mundo, llevo ya matados tres hombres y dos de ellos sacerdotes.”

Cándido, o el optimismo, Voltaire.

RESUMEN: Este capítulo está dedicado al estudio de la estabilidad de skyrmiones y redes de skyrmiones en sistemas ferromagnéticos bidimensionales. En primer lugar estudiamos la estabilidad de skyrmiones aislados en ferromagnetos quirales bajo la influencia de diferentes perturbaciones y campos externos. Para este fin, desarrollamos un procedimiento sistemático general basado en una expansión armónica del contorno de un skyrmión que permite la descripción de un skyrmión de forma arbitraria. Aplicamos nuestro enfoque a algunos modelos de espín representativos y de interés físico para obtener el diagrama de fases, a temperatura cero, en el que emergen skyrmiones aislados como estados metaestables. Finalmente estudiaremos la presencia de una fase de red de skyrmiones en una red triangular con interacción DM. Discutiremos el diagrama de fases de este sistema y analizaremos algunas de sus propiedades.

3.1. Skyrmiones aislados

3.1.1. Introducción

En los últimos años, el estudio de los skyrmiones magnéticos, texturas de espines localizadas con propiedades topológicas globales no triviales, han sido foco de una investigación intensa debido a sus interesantes propiedades, como tamaño pequeño (en la escala de los nanómetros) [16] y, como consecuencia de su naturaleza topológica, alta estabilidad y la presencia de una electrodinámica emergente. Estas propiedades y su potencial tecnológico han dado lugar al desarrollo y al rápido crecimiento del campo de la skyrmiónica [17–19, 98]. Desde el descubrimiento inicial de los skyrmiones en la fase A del sistema

magnético quiral MnSi [12, 14, 99], se ha reportado su presencia en una amplia variedad de sistemas, incluidos metales, semiconductores y aisladores, y algunos ejemplos de ellos son los compuestos $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ [34], FeGe [26–29], $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [22–25], GaV_4S_8 [100] y Cu_2OSeO_3 [36, 37], entre otros. Por un lado, se predijo que tales texturas magnéticas, con estructura de vórtice, pueden formarse en magnetos quirales [7–10, 30, 31] sin simetría de inversión. En particular, estos objetos se pueden estabilizar a través de una variedad de mecanismos, como el intercambio frustrado, las interacciones dipolares y la interacción DM (antisimétrica) [16] que se pueden encontrar en una gran variedad de materiales magnéticos. Por otro lado, se han dedicado numerosos esfuerzos a la manipulación de skyrmiones aislados, en particular, el control de su movimiento y la capacidad de crearlos y destruirlos son de interés por sus posibles aplicaciones tecnológicas. En esta dirección, investigaciones recientes han demostrado que los skyrmiones pueden manipularse de diferentes maneras por medio de campos externos [101, 102] y corrientes [103, 104] incluso a temperatura ambiente. Estas posibilidades abren el interrogante de cómo una determinada perturbación o interacción puede incidir en la textura de un skyrmión volviéndolo inestable y eventualmente cambiar su estructura. Bogdanov y Hubert realizaron un primer estudio de la estabilidad, enfocado particularmente en el análisis de una inestabilidad elíptica [8]. Con el mismo espíritu, pero en el contexto de las burbujas magnéticas, Thiele [105–107] estudió la estabilidad de una burbuja magnética cilíndrica ¹ bajo deformaciones arbitrarias. Sin embargo, no existe un enfoque general para estudiar la estabilidad de un skyrmión bajo deformaciones y/o interacciones arbitrarias.

En esta sección desarrollamos un método para analizar sistemáticamente la estabilidad bajo deformaciones arbitrarias de skyrmiones presentes en sistemas magnéticos bidimensionales. En particular, este enfoque permite el estudio de los skyrmiones donde la inestabilidad de su forma se debe a anisotropías microscópicas o campos externos. También es apropiado para el estudio de la manipulación por medio de campos eléctricos y magnéticos externos.

Para probar nuestro marco, aplicamos el método a tres modelos magnéticos de gran interés en el campo de la skyrmiónica. Primero, consideramos los modelos con interacción DM tanto isotrópicos como anisotrópicos [108], que proporcionan el punto de partida para el análisis de estabilidad de los modelos subsiguientes. Luego, para estudiar situaciones más relevantes, analizamos el efecto de un campo magnético inclinado y un campo eléctrico a través del acoplamiento magnetoelectrónico. En estas situaciones, nuestro análisis muestra que, para campos elevados y perturbaciones moderadas, es posible desestabilizar un skyrmión ajustando el campo magnético. Además, nuestros resultados muestran que, dependiendo de la intensidad de la interacción, la inestabilidad puede provocar deformaciones cardioidales, elípticas o triangulares.

3.1.2. Estabilidad de skyrmiones: formalismo general

La descripción de baja energía de un sistema magnético bidimensional general se puede caracterizar por una magnetización local representada por un campo vectorial unimodular

¹Una burbuja magnética es una configuración del campo de espines formada por dos dominios de magnetizaciones opuestas separados por una pared de dominio, de cierto espesor, que forma un contorno cerrado. Desde el punto de vista topológico una burbuja magnética es equivalente a un skyrmión ya que poseen la misma carga topológica, pero sus estructuras difieren considerablemente.

de tres componentes ($|\mathbf{m}(\mathbf{r})| = 1$) en cada sitio (llamaremos z al eje perpendicular al plano del sistema). Este campo vectorial representa un mapeo del espacio base \mathbb{R}^2 (asociado a la red bidimensional) en el espacio interno S^2 (cascarón esférico de radio unidad) del campo de magnetización. Para aquellas configuraciones que toman valores constantes en el infinito, el espacio base se puede compactificar en S^2 , y el mapa $(\mathbf{m}(\mathbf{r}) : S^2 \rightarrow S^2)$ puede clasificarse por el segundo grupo de homotopía $\pi_2(S^2) \approx \mathbb{Z}$ (ver Sec. 2.3.3.2) través de un invariante topológico, que ya hemos introducido en la Sec. 2.3.6, definido como [16]

$$\frac{1}{4\pi} \int d^2r \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot (\partial_x \mathbf{m}(\mathbf{r})) \times (\partial_y \mathbf{m}(\mathbf{r})) = Q \in \mathbb{Z}. \quad (3.1)$$

De esta manera, una configuración de campo magnético (o textura magnética) no trivial se caracteriza por una carga topológica conservada, llamada *carga del skyrmión*. Dentro de esta clasificación, un skyrmión magnético (antiskyrmión) es una configuración particular donde $Q > 0$ ($Q < 0$).

Para estudiar la inestabilidad de la forma de los skyrmiones, es conveniente utilizar coordenadas polares de forma tal que un punto \mathbf{r} en el plano se identifica con las cordenas radial y angular, r y θ respectivamente. El campo de magnetización de un skyrmión $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ se caracteriza por dos parámetros (constantes) que representan el radio (R , definido como la distancia desde el centro hasta el contorno donde $m_z = 1$) y la orientación (χ , generalmente denominada “helicidad” [16]) de la componente xy (contenida en el plano del sistema) de la magnetización. La estructura de tipo vórtices de un skyrmión centrado en el origen puede ser descripta por el ansatz de skyrmión de tamaño finito [7]:

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = (\sin \Theta \cos \Phi, \sin \Theta \sin \Phi, \cos \Theta), \quad (3.2)$$

donde $\Theta = \Theta(r) = f(r/R)$, $\Phi = \theta + \chi$, y $f(r/R)$ está dado por

$$f(r/R) = \begin{cases} \pi(1 - \frac{r}{R}) & r \leq R \\ 0 & r > R. \end{cases}$$

Para un skyrmión de forma arbitraria (ver Fig. 3.1 (a)), ambos R y χ dependen del ángulo polar θ [109]. Por lo tanto el radio del skyrmión se puede escribir como

$$R(\theta) = R_0 + \sum_{n=1}^{\infty} R_n \cos(n\theta + \beta_n), \quad (3.3)$$

donde R_0 representa el radio de equilibrio del skyrmión, y el segundo término representa las pequeñas deformaciones escritas como una expansión en armónicos con coeficientes $R_n \ll R_0$ (ver Fig. 3.1). El ángulo entre la componente xy de la magnetización y la tangente a la curva definida por $m_z = \text{const.}$ permanece aproximadamente constante a lo largo del contorno [110]. Para preservar esta condición en un perfil deformado, debemos reemplazar el parámetro χ con una función $\chi(\theta)$. Para pequeñas perturbaciones de la forma del skyrmión, $\chi(\theta)$ está dada hasta segundo orden en las perturbaciones (es decir,

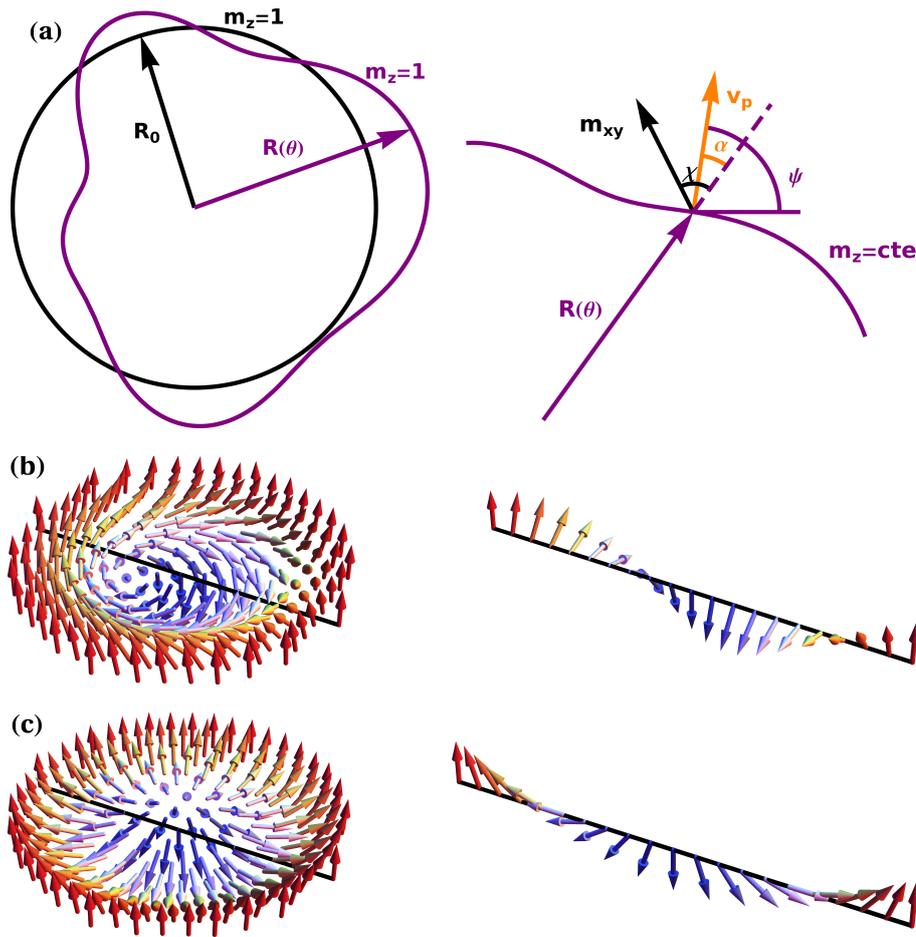


Figura 3.1: Parametrización de la forma de un skyrmión y tipos de skyrmiones. (a) Las líneas negra y violeta representan contornos en los que la componente m_z es constante para el caso de un skyrmión con simetría axial y un skyrmión de forma arbitraria respectivamente. La flecha naranja es el vector normal (\mathbf{v}_p) a la curva $m_z = cte.$, la flecha negra representa la componente xy del espín (\mathbf{m}_{xy}). Una representación de (b) un skyrmión tipo Bloch y (c) un skyrmión tipo Néel. A la derecha de estas figuras representamos el perfil del campo de espines a lo largo de la línea negra que atraviesa el skyrmión.

hasta segundo orden en R_n) por

$$\chi(\theta) = \chi_0 - \frac{\delta R'(\theta)}{R_0} + \frac{\delta R(\theta)\delta R'(\theta)}{R_0^2}, \quad (3.4)$$

donde $\delta R(\theta) = R(\theta) - R_0$, y χ_0 es la orientación de la configuración de equilibrio. El caso $\chi_0 = \pm\pi/2$ corresponde a skyrmiones tipo Bloch (ver Fig. 3.1 (b)), donde la componente xy es paralela al contorno $m_z = \text{const.}$ con una rotación de los spines en el sentido horario o antihorario, mientras que $\chi_0 = 0$ corresponde a un skyrmión de Néel [100] (ver Fig. 3.1 (c)) donde las componentes xy del espín son perpendiculares a $m_z = \text{const.}$ La condición en la Ec. 3.4 puede ser deducida de la siguiente forma. Comenzamos escribiendo los vectores

tangente (\mathbf{v}_t) y perpendicular (\mathbf{v}_p) a la curva $R(\theta)$ (ver Fig. 3.1 (a)),

$$\mathbf{v}_t = \left(\frac{\partial x}{\partial \theta}, \frac{\partial y}{\partial \theta} \right), \quad (3.5)$$

$$\mathbf{v}_p = \left(\frac{\partial y}{\partial \theta}, -\frac{\partial x}{\partial \theta} \right), \quad (3.6)$$

donde $x = R(\theta) \cos(\theta)$ y $y = R(\theta) \sin(\theta)$. Escribimos $\mathbf{v}_t = v(\theta)(-\sin(\psi), \cos(\psi))$ y $\mathbf{v}_p = v(\theta)(\cos(\psi), \sin(\psi))$, con $\psi = \theta + \alpha(\theta)$. Si la curva fuera un círculo, entonces el vector normal se obtendría tomando $\psi = \theta$. Queremos encontrar $\alpha(\theta)$ en términos de $R(\theta)$ por lo que comenzamos con las ecuaciones:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial x}{\partial \theta}, \frac{\partial y}{\partial \theta} \right) &= v(\theta)(-\sin(\psi), \cos(\psi)), \\ \left(\frac{\partial y}{\partial \theta}, -\frac{\partial x}{\partial \theta} \right) &= v(\theta)(\cos(\psi), \sin(\psi)). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Las ecuaciones anteriores contienen la misma información y utilizaremos la segunda de ellas (que define a \mathbf{v}_p) para escribir el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} v(\theta) [\cos(\theta) \cos(\alpha) - \sin(\theta) \sin(\alpha)] &= R'(\theta) \sin(\theta) + R(\theta) \cos(\theta), \\ v(\theta) [\cos(\theta) \sin(\alpha) + \sin(\theta) \cos(\alpha)] &= -R'(\theta) \cos(\theta) + R(\theta) \sin(\theta), \end{aligned} \quad (3.8)$$

que podemos reescribirlo de forma matricial definiendo las variables $A = v(\theta) \cos(\alpha)$ y $B = v(\theta) \sin(\alpha)$ de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\theta) & \cos(\theta) \\ -\cos(\theta) & \sin(\theta) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} R' \\ R \end{pmatrix}.$$

Este sistema se resuelve para A y B de la siguiente manera: $A = R(\theta)$ y $B = -R'(\theta)$. Dado que estamos considerando curvas en las que el vector normal se puede definir, requerimos que $R(\theta)$ sea una función monovaluada² y $v(\theta) \neq 0$. Luego, del sistema de ecuaciones previo, tomando el cociente B/A encontramos

$$\tan(\alpha) = -\frac{R'(\theta)}{R(\theta)}. \quad (3.9)$$

Estamos interesados en el análisis de estabilidad, que requiere la expansión de la energía hasta el segundo orden en las deformaciones, por lo que expandimos el lado izquierdo hasta el segundo orden en α y el lado derecho de la ecuación anterior hasta el segundo

²Con esta condición evitamos curvas que se intersecten consigo mismas y la posibilidad de que para un mismo valor de θ existan distintos vectores normales \mathbf{v}_p . Esta condición es válida para perturbaciones suficientemente pequeñas $R_n \ll R_0$.

orden en R_n :

$$\tan(\alpha) \approx \alpha + \mathcal{O}(\alpha^3), \quad (3.10)$$

$$-\frac{R'(\theta)}{R(\theta)} \approx -\frac{\delta R(\theta)'}{R_0} \left[1 - \frac{\delta R(\theta)}{R_0} \right]. \quad (3.11)$$

Finalmente, resolvemos para $\alpha(\theta)$ y encontramos

$$\alpha(\theta) = -\frac{\delta R(\theta)'}{R_0} + \frac{\delta R(\theta)}{R_0} \frac{\delta R(\theta)'}{R_0}. \quad (3.12)$$

Luego escribimos $\chi(\theta) = \chi_0 + \alpha(\theta)$. Si $\chi_0 = 0$ el vector $(\cos(\theta + \chi(\theta)), \sin(\theta + \chi(\theta)))$ es perpendicular a la curva $R(\theta)$, y si $\chi_0 = \pm\pi/2$ el vector es tangente a la curva. Con esta definición de $\chi(\theta)$ el ángulo que forma el vector tangente a la curva $m_z = cte.$ y la componente xy de la magnetización se mantiene constante independientemente de la forma de esta curva. De esta forma mediante las Ecs. 3.3 y 3.4 completamos la descripción de un skyrmión de forma arbitraria. En la Fig. 3.2 representamos skyrmiones con distintas geometrías.

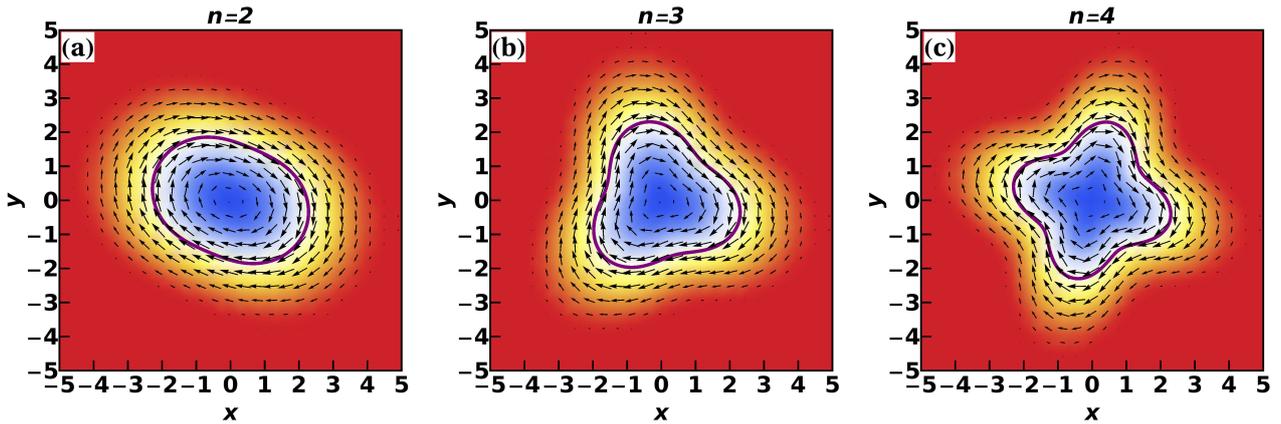


Figura 3.2: Representaciones de skyrmiones con una deformación elíptica (a), una deformación triangular (b) y una deformación cuadrada (c), obtenidas con la parametrización discutida en el texto. Los contornos violeta son aquellos para los cuales $m_z = 0$.

El método para buscar las inestabilidades de un skyrmión se puede resumir entonces en los siguientes cuatro pasos:

- (1) Suponiendo que el campo de espines varía suavemente, realizamos una expansión en gradientes del Hamiltoniano microscópico de espines.
- (2) Calculamos la energía de un solo skyrmión como

$$E_{Sk} = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty r \mathcal{H}(r, \theta) dr, \quad (3.13)$$

donde $\mathcal{H}(r, \theta)$ es la densidad de energía evaluada en el ansatz anterior (Ecs. 3.2-3.4), y de la cual substraemos la energía del estado polarizado según el campo magnético

externo

$$E_{FP} = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty r B dr, \quad (3.14)$$

lo que da

$$E = E_{Sk} - E_{FP} = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{R(\theta)} r \mathcal{H}(r, \theta) dr. \quad (3.15)$$

- (3) Expandimos la energía hasta el segundo orden en R_n alrededor de la configuración circular (con radio R_0 y helicidad χ_0) y obtenemos una expresión que toma la forma general

$$E = E_0 + \sum_{n=1}^{\infty} L_n R_n + \sum_{n,m=1}^{\infty} R_n M_{nm} R_m, \quad (3.16)$$

donde E_0 , que representa la energía del skyrmión con simetría axial, y los coeficientes L_n y M_{nm} , son expresados en términos de los parámetros microscópicos (constantes de acoplamiento de espín) y los parámetros externos (acoplamientos con campos externos) del modelo.

- (4) El análisis de estabilidad implica el estudio del signo de los autovalores de la matriz M_{nm} . Estos valores propios son funciones de los parámetros microscópicos y de los campos externos. La condición de estabilidad requiere autovalores positivos de M_{nm} , que a su vez determinan el diagrama de fases donde el skyrmión puede existir como un estado metaestable. Finalmente, determinamos la forma del skyrmión, en la región de estabilidad hallada anteriormente, minimizando la energía con respecto a R_n ,

$$R_n = -\frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} M_{nm}^{-1} L_m. \quad (3.17)$$

Para un tratamiento adecuado del análisis de estabilidad debemos considerar la serie completa de armónicos en la expansión Ec. 3.3, lo que conduce al problema de diagonalización de la matriz M en la Ec. 3.16 que, a primera vista, puede parecer complicado ya que la matriz es de dimensión infinita. Sin embargo, debemos tener en cuenta algunas propiedades importantes de la matriz M que simplifican el análisis. En primer lugar, dentro del límite continuo, se debe considerar a M como una matriz de dimensión finita. Para ver esto, debemos tener en cuenta que los armónicos más altos representan fluctuaciones de pequeña escala de longitud en el campo de espines; entonces la validez de la expansión en la Ec. 3.3 está restringida por la plausibilidad de la descripción del continuo. Por lo tanto, para un valor suficientemente alto (digamos, N) del índice n , la descripción del continuo pierde validez. Esto introduce un corte natural en la expansión en Ec. 3.3 que limita la suma hasta los primeros N términos. En segundo lugar, a partir de nuestro enfoque, encontramos que la estructura general de la matriz corresponde a una matriz de banda y simétrica. Si bien este problema se puede estudiar numéricamente, para mantener nuestro análisis en su forma más simple y para proporcionar resultados analíticos, consideramos las primeras cuatro deformaciones en la expansión de la Ec. 3.3; y como veremos más adelante, la incorporación de armónicos de orden superior no modifican estos resultados.

Entonces, el problema se reduce al estudio de una matriz cuadrada de dimensión inferior. Como se muestra en los modelos considerados aquí, esos pocos armónicos son suficientes para una descripción fenomenológica, lo que hace de este método una herramienta poderosa, incluso en su forma más simple.

3.1.3. Aplicación del método

En esta sección se presentan los resultados obtenidos mediante la aplicación del método que hemos introducido a varios modelos de interés. Primero consideramos el modelo de Heisenberg con interacciones de intercambio incluyendo la interacción de DM isotrópica y anisotrópica [108]. Luego estudiamos el efecto de la inclinación del campo magnético respecto a la dirección normal al plano del sistema [111]. Y finalmente, estudiamos el efecto del acoplamiento magneto-eléctrico de los espines con un campo eléctrico externo [112–114].

3.1.3.1. Interacción de Dzyaloshinskii-Moriya

El primer ejemplo corresponde al modelo ferromagnético de Heisenberg con interacciones a primeros vecinos, en el que incluimos la interacción DM anisotrópica [108], por lo que el Hamiltoniano microscópico para la red cuadrada (2D) se escribe de la siguiente forma:

$$H = - \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \{ J \mathbf{m}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{r}+\delta_{\alpha}} + D_{\alpha} \delta_{\alpha} \cdot (\mathbf{m}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{m}_{\mathbf{r}+\delta_{\alpha}}) \} - B \sum_{\mathbf{r}} m_{\mathbf{r}}^z, \quad (3.18)$$

donde $\alpha = x, y$, δ_{α} es el vector unitario a lo largo de la dirección α ($\delta_x = \hat{\mathbf{x}}$, $\delta_y = \hat{\mathbf{y}}$) y $\mathbf{m}_{\mathbf{r}}$ es el espín clásico en el sitio \mathbf{r} . En la ecuación anterior, la anisotropía en el término DM se introduce al adoptar diferentes coeficientes D_x y D_y para las direcciones x e y , respectivamente (ver Fig. 3.3). El campo magnético apunta en la dirección del eje z y es perpendicular al plano del sistema.

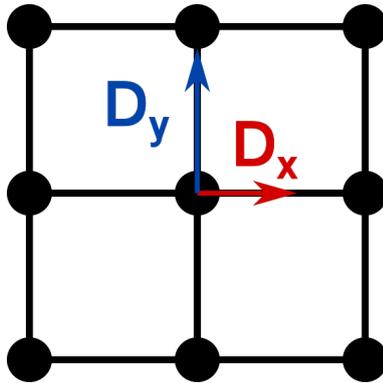


Figura 3.3: Representación de la interacción de DM anisotrópica para una red cuadrada. En el caso representado en esta figura $D_x < D_y$.

Realizamos una expansión del Hamiltoniano microscópico en gradientes del espín \mathbf{m}

haciendo la aproximación

$$\mathbf{m}(\mathbf{r} + a\hat{\mathbf{e}}) \approx \mathbf{m}(\mathbf{r}) + a(\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)\mathbf{r} + a^2 \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)^2 \mathbf{m}(\mathbf{r}) + \mathcal{O}(a^3), \quad (3.19)$$

donde $\hat{\mathbf{e}}$ es un vector unitario y a es el parámetros de red.

Al introducir este desarrollo en el término de intercambio tenemos que, por ser \mathbf{m} un campo unimodular, la contribución a orden a^0 es una constante (que despreciaremos en las siguientes secciones) y la contribución a orden a^1 es nula (en efecto $\mathbf{m} \cdot (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)\mathbf{m} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}) = 0$, ya que $|\mathbf{m}| = 1$). A orden a^2 el término de intercambio puede reescribirse integrando por partes de la siguiente manera

$$\mathbf{m} \cdot (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)^2 \mathbf{m} = (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla) [\mathbf{m} \cdot (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)\mathbf{m}] - (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla \mathbf{m}) \cdot (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla \mathbf{m}). \quad (3.20)$$

El primer término de esta ecuación contribuirá con un término de borde al reemplazar la sumatoria sobre sitios por una integral en el plano, por lo que despreciaremos su contribución en lo que sigue. Procedemos de la misma forma que hicimos antes para expandir el término de DM. El término de orden a^0 se anula ($\hat{\mathbf{e}} \cdot (\mathbf{m} \times \mathbf{m}) = 0$). El término de orden a^2 lo podemos descartar ya que contribuye con un término de borde ($\hat{\mathbf{e}} \cdot [\mathbf{m} \times (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)^2 \mathbf{m}] = (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla) [\hat{\mathbf{e}} \cdot (\mathbf{m} \times (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)\mathbf{m})] - \hat{\mathbf{e}} \cdot [(\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla \mathbf{m}) \times (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla \mathbf{m})]$). Por lo tanto en el término de DM consideramos solo contribuciones de orden a^1 de la forma

$$\hat{\mathbf{e}} \cdot [\mathbf{m} \times (\hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla)\mathbf{m}]. \quad (3.21)$$

En el límite continuo la densidad de energía para el Hamiltoniano Ec. 3.18 es:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha=x,y} \left\{ \frac{J}{2} (\partial_\alpha \mathbf{m})^2 + D_\alpha \delta_\alpha \cdot (\mathbf{m} \times \partial_\alpha \mathbf{m}) \right\} - B m_z. \quad (3.22)$$

Usando el ansatz de la Ec. 3.2 con los desarrollos de las Ecs. 3.3, 3.4 y 3.15 en la ecuación anterior, los diferentes términos de energía están dados por

$$E^\nu = E_0^\nu + \sum_{n=1}^{\infty} L_n^\nu R_n + \sum_{n,m=1}^{\infty} (M_{nm}^\nu R_n R_m), \quad (3.23)$$

en donde, por medio del índice ν , se identifican los casos isotrópico ($\nu = I$, en donde $D_x = D_y$) y anisotrópico ($\nu = A$, en donde $D_x \neq D_y$) que se analizarán en esta sección. Los coeficientes E_0^ν , L_n^ν , M_{nm}^ν dependen de J , $D^\pm = D_y \pm D_x$, B , R_0 y χ_0 (las expresiones analíticas de estos coeficientes figuran en el Apéndice A). El vector L_n^ν y la matriz M_{nm}^ν dependen también de las variables β_n . Los parámetros R_0 y χ_0 , que definen la configuración y estructura del skyrmión no perturbado, se obtienen por minimización directa de la energía total, estableciendo $R_n = 0$, $\forall n$ en la Ec. 3.23 (en el caso general establecemos $R_n = 0$ en la Ec. 3.16 y calculamos R_0 y χ_0). Finalmente, determinamos la estabilidad de una configuración dada usando estos valores en la Ec. 3.23. Vamos a considerar dos casos del modelo anterior: (1) Caso isotrópico, $D_x = D_y$ ($D^- = 0$): es conocido que en este sistema se encuentran skyrmiones con simetría axial (circulares) [7, 8, 115]. (2) Caso anisotrópico, $D_x \neq D_y$ ($D^- \neq 0$): en este caso, las deformaciones de los skyrmiones son

elípticas y pueden cristalizar en una red triangular de skyrmiones distorsionada [108].

■ 1. Caso isotrópico

Comenzamos con el modelo *isotrópico* fijando $D_x = D_y = D$ en la Ec. 3.23. En base a los resultados obtenidos para este caso se analizará, en las próximas secciones, el efecto de la anisotropía en la interacción DM, la orientación del campo magnético y un campo eléctrico, como una perturbación alrededor del skyrmión circular. En el caso isotrópico tenemos entonces $D^- = 0$, y la energía tiene una expresión muy simple dada por

$$E^I = E_0^I + \sum_{n,m=1}^{\infty} \tilde{M}_{nm}^I R_n R_m. \quad (3.24)$$

La matriz \tilde{M}_{nm}^I no depende de β_n , y los parámetros de equilibrio R_0 y χ_0 son (para $B > 0$)

$$R_0 = \frac{\Lambda_4 |D|}{2\Lambda_3 B}, \quad \chi_0 = -\text{sign}(D) \frac{\pi}{2}, \quad (3.25)$$

siendo $\text{sign}(D)$ es el signo de D . La matriz $\tilde{M}_{nm}^I = \lambda_n^I \delta_{nm}$ es diagonal con autovalores

$$\lambda_n^I = \pi \left[\frac{J}{2} (\Lambda_1 n^2 + \Lambda_2 n^4) \left(\frac{2\Lambda_3 B}{\Lambda_4 D} \right)^2 + (n^2 - 1) B \Lambda_3 \right], \quad (3.26)$$

donde los valores explícitos para las constantes Λ_i se indican en el Apéndice A. La estabilidad bajo una deformación dada requiere $\lambda_n^I > 0$. Esta condición introduce un conjunto de campos críticos de la forma $B_n^I = F_n D^2$:

$$F_n = \frac{2\Lambda_3(1 - n^2)}{J(\Lambda_1 n^2 + \Lambda_2 n^4)} \left(\frac{\Lambda_4}{2\Lambda_3} \right)^2. \quad (3.27)$$

Por lo tanto, para $B < B_n^I$ el n -ésimo modo se vuelve inestable. Una consecuencia importante es que para el modo $n = 1$ tenemos $F_1 = 0$, y por lo tanto el primer modo es estable para todos los valores de $B > 0$. Es fácil ver que para $n \geq 2$, $F_n > F_{n+1}$. Esto define la región de estabilidad de los skyrmiones en el diagrama de fases mostrado en la Fig. 3.4 (a). Entonces, el primer modo inestable corresponde a $n = 2$ (deformación elíptica). El campo crítico correspondiente está dado por

$$B_2^I = \frac{-6\Lambda_3}{J(4\Lambda_1 + 16\Lambda_2)} \left(\frac{\Lambda_4}{2\Lambda_3} \right)^2 D^2. \quad (3.28)$$

Es importante tener en cuenta que en la Ec. 3.24 no hay términos lineales en la energía ($\tilde{L}_n^I = 0$). En consecuencia, $R_n = 0, \forall n$, y la configuración estable corresponde a la circular (Fig 3.9 (a)). En vista de nuestro resultado, la inestabilidad de un skyrmión es conducida por una deformación elíptica. Esto sugiere que el skyrmión se convierte en un dominio helicoidal como lo explica la teoría desarrollada en Ref. [8]. Este proceso de “alargamiento” se observó en los skyrmiones quirales [8, 31], así como en burbujas magnéticas [32, 33, 106]. El campo crítico que obtenemos para la estabilidad de un skyrmión es $B_2^I(D) \approx 0,317D^2$,

y este valor es consistente con el campo crítico ($B_H(D) \approx 0,20D^2$) para la transición desde la red de skyrmiones (SkX) al estado helicoidal (H) reportado por Han et al. [115].

■ 2. Caso anisotrópico

Ahora analizamos el caso *anisotrópico* ($D_x \neq D_y$) de la Ec. 3.23. Hay tres aspectos importantes de la ecuación anterior que se deben destacar. Primero, la introducción de anisotropía genera acoplamientos entre las deformaciones representadas por el modo n y $n + 2$; segundo, la energía depende de los valores de β_n (ver Ec. 3.3); y en tercer lugar, hay un término lineal en R_2 (en este caso $L_n^A = L_2^A \delta_{n2}$, ver el Apéndice A). El primer punto representa un cambio en la parte cuadrática a una forma cuadrática no diagonal, pero en este caso, el estudio de la estabilidad es un problema sencillo de diagonalización. El segundo punto es una consecuencia de la anisotropía del modelo, por lo que las diferentes orientaciones del skyrmión tendrán diferentes energías. Sin embargo, el punto más importante es el tercero, que sugiere fuertemente la presencia de un valor finito de R_2 , es decir, una deformación elíptica de estos skyrmiones.

Los valores de β_n que minimizan la energía (suponiendo que $D^- > 0$ y $D^+ > 0$) satisfacen las ecuaciones

$$\begin{aligned} \chi_0 - 2\beta_1 &= \pi/2, \\ \beta_2 - \chi_0 &= \pi/2, \\ \beta_n - \beta_{n+2} + \chi_0 &= 3\pi/2, \forall n > 2, \end{aligned} \quad (3.29)$$

donde los parámetros de equilibrio son $R_0 = \frac{\Lambda_4 D^+}{4\Lambda_3 B}$, $\chi_0 = -\frac{\pi}{2}$. A partir de las ecuaciones anteriores, vemos que $\beta_1 = 3\pi/2$, $\beta_2 = 0$ y $\beta_{n+2} = \beta_n + 2k_n\pi$, $k_n \in \mathbb{Z}$, con lo que obtenemos la forma general para $\beta_n = \frac{3\pi}{2} \left(\frac{1+(-1)^{n+1}}{2} \right)$.

Por lo tanto, vemos que la energía del skyrmión como función de R_n está dada por

$$E^A = E_0^A + \tilde{L}_2^A R_2 + \sum_{n,m=1}^{\infty} R_n \tilde{M}_{nm}^A R_m, \quad (3.30)$$

donde \tilde{L}_2^A y \tilde{M}_{nm}^A son el vector L_n^A y la matriz M_{nm}^A , con β_n evaluados en los valores determinados a través de la Ec. 3.29. Como se mencionó anteriormente, la inestabilidad de la fase de skyrmión circular dependerá de la identificación de los valores propios negativos de la matriz \tilde{M}^A . Vamos a considerar solo los primeros cuatro modos en la expansión de la Ec. 3.3 para calcular los valores propios de la matriz \tilde{M}^A (de dimensión 4×4). Con esta simplificación, los campos críticos y las deformaciones pueden calcularse analíticamente. Las expresiones obtenidas son complejas para incluirlas en el texto (una situación que se repite en el resto de los modelos estudiados). Sin embargo, son muy importantes para determinar el comportamiento general de los campos críticos y las deformaciones³. También nos permite probar el grado de convergencia del método. Al final de esta sección, mostraremos que estos resultados analíticos son consistentes con los resultados numéricos para una expansión que contiene los primeros 100 modos.

³Hemos escrito en el Apéndice A las expresiones para E_0 , el vector L_n y la matriz M_{nm} a partir de los cuales se pueden deducir las expresiones analíticas de las deformaciones y los campos críticos.

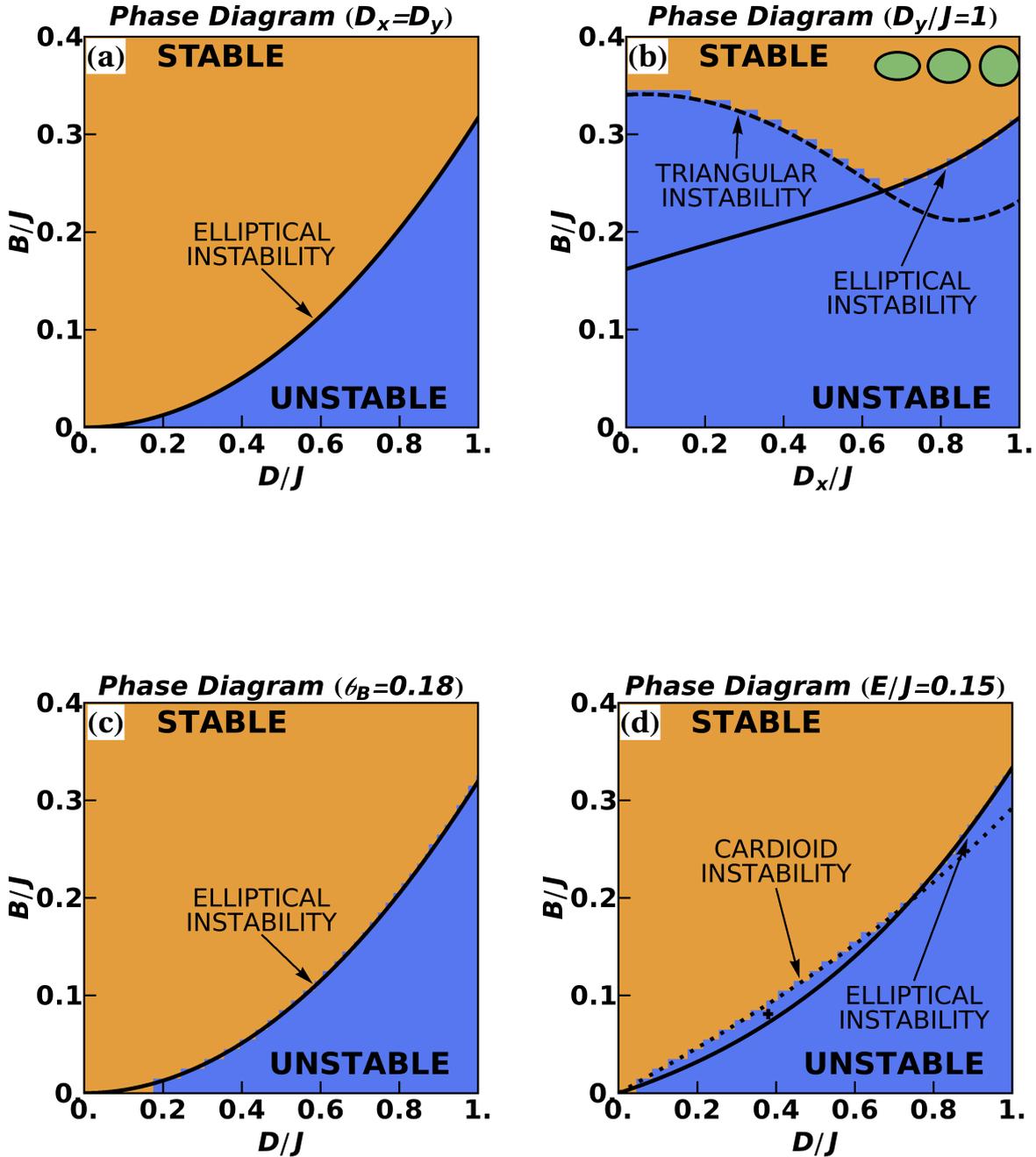


Figura 3.4: Diagramas de la fases de estabilidad de skyrmiones aislados para los modelos estudiados. El fondo de color (naranja y azul) corresponde a los resultados numéricos de 100 modos. En la región naranja, los skyrmiones son estables y en la azul son inestables. (a) Modelo con interacción DM isotrópica en un campo magnético transversal: la curva sólida es el campo crítico B_2^I . (b) Modelo con interacción DM anisotrópica (para $D_y/J = 1$) en un campo magnético transversal: la curva sólida representa B_2^A y la discontinua B_3^A . En verde representamos la deformación de un skyrmión circular (a la derecha) a un skyrmión elíptico al incrementar la anisotropía. (c) Modelo con interacción DM isotrópica en un campo magnético inclinado: la línea continua es el campo crítico $B_2^{ZT}(\theta_B)$ para $\theta_B = 0,18$. (d) Modelo con interacción DM isotrópica en campo eléctrico ($E/J = 0,15$) y campo magnético transversales. Las líneas son los campos magnéticos críticos B_1^{MEP} (punteada) y B_2^{MEP} (sólida).

El signo de los valores propios depende del campo magnético externo (B) y de la interacción DM (D_x y D_y). La condición $\lambda_n^A > 0$ define la región de estabilidad en el diagrama de fases (D_x, D_y, B). Encontramos que, para un valor fijo de D^\pm , la configuración será estable cuando el campo magnético externo sea mayor que los campos críticos B_2^A y B_3^A . En el límite isotrópico ($D_x \rightarrow D_y$), estos campos críticos coinciden con los campos críticos B_2^I y B_3^I del problema isotrópico. Por lo tanto, nos referimos a B_2^A y B_3^A como los campos críticos para las inestabilidades elípticas y triangulares, respectivamente.

En la Fig. 3.4(b) presentamos el diagrama de fases para $D_y/J = 1$. En la región $D_x/J \gtrsim 0,66$, el campo crítico B_2^A (curva negra) es más grande que B_3^A (curva de puntos negros), mientras que $B_3^A > B_2^A$ en la región $D_x/J \lesssim 0,66$. Para pequeños valores de anisotropía, la inestabilidad del skyrmión tiene lugar a través de una deformación elíptica como ocurre en el caso isotrópico. En el extremo opuesto, cuando $D_x = 0$, el sistema se comporta como un conjunto de cadenas de espines acopladas entre sí solo por intercambio ferromagnético. En cada cadena, los espines interactúan con sus vecinos a través del intercambio ferromagnético y la interacción DM en la dirección \hat{y} . A partir de nuestro diagrama de fases, Fig. 3.4(b), observamos que el skyrmión pierde estabilidad a través de una deformación triangular.

La forma del skyrmión está determinada por los valores de R_1, R_2, R_3 y R_4 que minimizan la energía en la región de estabilidad. En el caso isotrópico $D^- = 0$, el skyrmión es circular, como vimos en la discusión anterior. Para $D^- \neq 0$, los coeficientes R_1 y R_3 son idénticamente nulos, mientras que $R_2 \propto D^-$ y $R_4 \propto (D^-)^2$. Por lo tanto, en el régimen de anisotropía pequeña, la forma del skyrmión es aproximadamente elíptica, como se muestra en la Fig. 3.9 (b). Para ilustrar cómo depende la forma del skyrmión de D_x y D_y , presentamos, en la Fig. 3.4(b), la forma de skyrmion para $D_y/J = 1$ y $0 \leq D_x/J \leq 1$. A medida que disminuye el valor de D_x , el skyrmión se alarga a lo largo de la dirección \hat{x} , esencialmente a través de una deformación elíptica.

Podemos comparar este resultado con los resultados encontrados por Shibata y colaboradores [108]. En este trabajo, los autores estudiaron películas de FeGe bajo tensión uniaxial. Esta tensión es inducida en la muestra por medio de esfuerzos térmicos. Como se muestra en la Fig. 3.5 la estructura de la red de skyrmiones, y también los skyrmiones en sí, se deforman a lo largo de la dirección de la tensión. Para explicar este fenómeno, propusieron una interacción de DM anisotrópica (como la discutida previamente) inducida por esfuerzos térmicos. Nuestros resultados en el caso anisotrópico demuestran cómo esta deformación, y la forma del skyrmión, dependen de los parámetros microscópicos.

Ahora discutimos los resultados numéricos. En la Fig. 3.4(b) se representa el diagrama de fases obtenido con el enfoque numérico para una expansión de $n = 100$ modos en la Ec. 3.3. Los límites entre la región estable (naranja) y la inestable (azul) están delimitados por los campos críticos B_2^A y B_3^A , calculados analíticamente, mostrando un excelente acuerdo entre ambos enfoques. Otro resultado importante del enfoque numérico se refiere al comportamiento de los coeficientes R_n (ver Fig. 3.6(a)). Para valores impares de n , $R_n = 0$, mientras que para valores pares, R_n es una función que decrece rápidamente con n . Las deformaciones más relevantes son las elípticas (R_2) y cuadradas (R_4), que sirven como una verificación de autoconsistencia de ambos enfoques.

En la Ref. [108] los autores consideraron el modelo con una interacción de DM anisotrópica con valores de $D_x/J = 0,144$, $D_y/J = 0,18$ (correspondiente a una anisotropía de

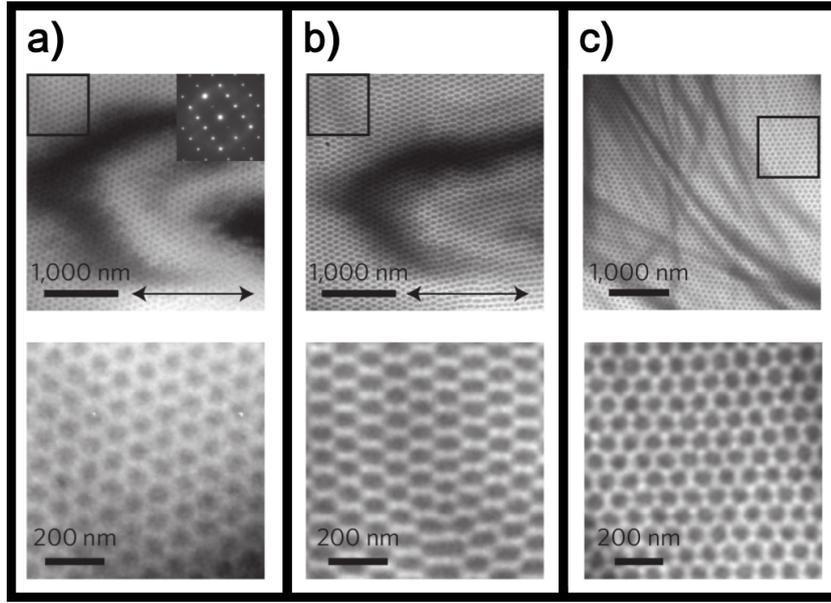


Figura 3.5: Micrografías Lorentz TEM de redes de skyrmiones en láminas de FeGe (figura extraída de Ref. [108]): (a) skyrmiones circulares a $T = 260\text{K}$, (b) skyrmiones elípticos en una lámina sometida a esfuerzos de tensión a $T = 94\text{K}$, (c) skyrmiones circulares en una muestra libre de efectos de esfuerzos a $T = 94\text{K}$.

$\eta = 1 - D_x/D_y = 0,2$) y $B/J = 0,015$, que reproduce las observaciones experimentales. Nuestros cálculos para estos valores de D_x/J y D_y/J muestran que los skyrmiones son estables por encima de $B/J = 0,0086$, que está muy por debajo del valor experimental. Por lo tanto, de acuerdo con nuestros hallazgos, los skyrmiones son estables para el campo magnético considerado por ellos. También introducen el grado de deformación $\delta = (1 - w_y/w_x)/(1 + w_y/w_x)$, donde w_x y w_y son los diámetros de los skyrmiones medidos en las direcciones x y y , respectivamente. Encontraron que $\delta = 0,25$, lo cual coincide cualitativamente con nuestra estimación, $\delta = 0,14$.

3.1.3.2. Campo magnético inclinado

Ahora estudiamos el efecto de la inclinación del campo magnético en el sistema isotrópico. Parametrizamos el campo magnético de la siguiente manera

$$\mathbf{B} = B(\sin(\theta_B) \cos(\phi_B), \sin(\theta_B) \sin(\phi_B), \cos(\theta_B)) \quad (3.31)$$

donde ϕ_B y θ_B representan el ángulo azimutal y polar, respectivamente (Fig. 3.7). En este caso, consideramos que el campo de espines para el skyrmión está dado por la Ec. 3.2, con $f(r/R)$ y Φ dados por:

$$f(r/R) = \begin{cases} \pi(1 - \frac{r}{R}) & r \leq R \\ \theta_B & r > R, \end{cases}$$

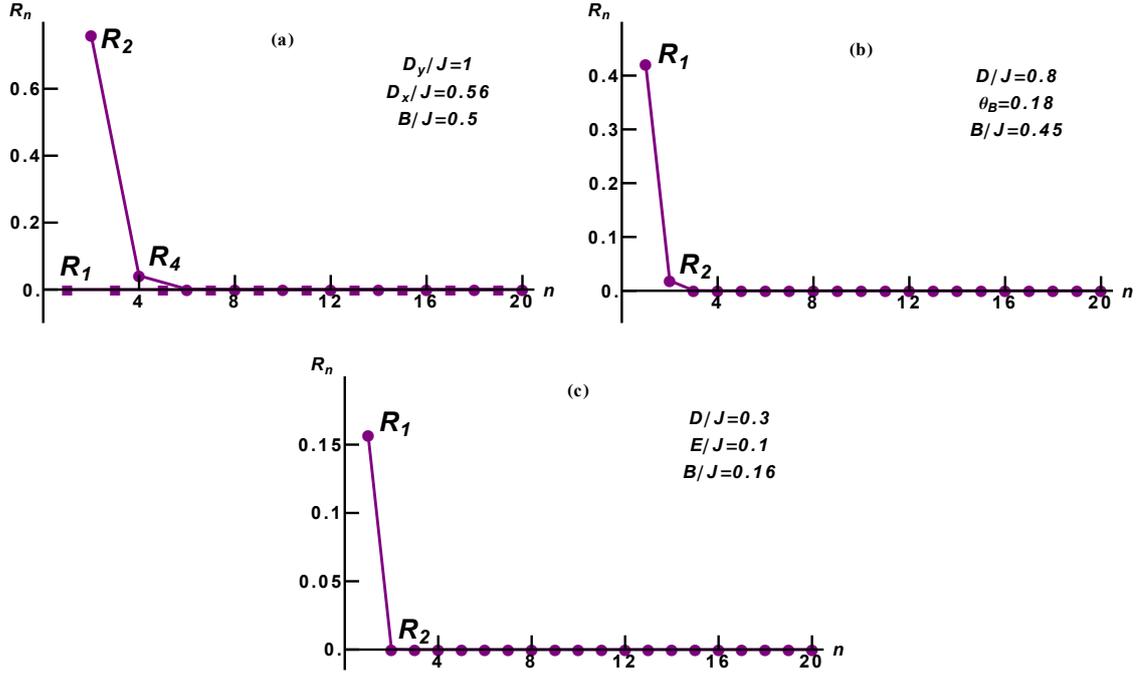


Figura 3.6: (a) Los coeficientes R_n para el modelo con interacción DM anisotrópica ($D_y/J = 1$, $D_x/J = 0,56$ y $B/J = 0,5$). Los círculos (cuadrados) son los valores de R_n con valores pares (impares) de n . (b) Coeficientes R_n para el modelo isotrópico en un campo magnético inclinado ($D/J = 0,8$, $\theta_B = 0,18$ y $B/J = 0,45$). (c) Coeficientes R_n para el modelo isotrópico en un campo eléctrico externo paralelo al plano de la muestra ($D/J = 0,3$, $E/J = 0,1$ y $B/J = 0,16$).

$$\Phi(r) = \begin{cases} \phi + \chi & r \leq R \\ \phi_B & r > R. \end{cases}$$

Debemos notar que el campo de espines tiene una discontinuidad en $r = R$. Esta contribución a la energía del sistema, que llamaremos E_D , crecerá proporcionalmente al perímetro del skyrmión $E_D \propto R$, mientras que la energía del skyrmión es proporcional al área del mismo $E_{Sk} \propto R^2$. Por lo tanto en un sistema real (en el que los skyrmiones tienen un radio que es mucho mayor que el parámetro de red a del sistema) E_D será despreciable frente a E_{Sk} . Por otra parte, suponiendo que el ángulo de inclinación θ_B es pequeño ($\theta_B \ll 1$), la contribución de esta discontinuidad a la energía es del orden de θ_B^2 (ver Apéndice A) y podemos despreciarla para pequeños ángulos de inclinación del campo magnético.

En este límite, todos los términos de la energía permanecen sin cambios con respecto a la Ec. 3.24, excepto el término de Zeeman que toma la forma:

$$E^{ZT} = E_0^{ZT} + \sum_n L_n^{ZT} R_n + \sum_{n,m=1}^{\infty} R_n M_{nm}^{ZT} R_m. \quad (3.32)$$

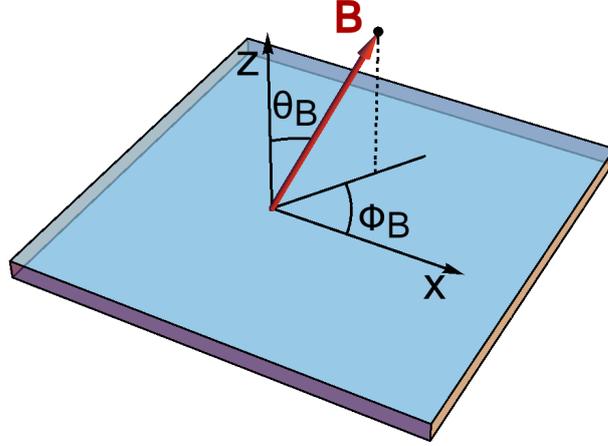


Figura 3.7: Ángulos azimutal (ϕ_B) y polar (θ_B) para una configuración con campo inclinado **B**.

Las expresiones de E_0^{ZT} , L_n^{ZT} y M_{nm}^{ZT} están dadas en el Apéndice A. Como consecuencia de un ángulo de inclinación (aún siendo pequeño) existe un acoplamiento entre diferentes amplitudes de deformación R_n . Además, encontramos un término lineal proporcional a R_1 , lo que permite una deformación del skyrmión a través de un valor finito de R_1 . Para fijar ideas consideramos $0 \leq \theta_B \leq \pi/2$ y $0 \leq \phi_B \leq \pi$. Bajo estos supuestos, los valores de β_n correspondientes al mínimo de energía son:

$$\beta_n = n(\chi_0 - \phi_B). \quad (3.33)$$

La determinación de los parámetros de equilibrio (R_0 y χ_0) y el análisis de estabilidad de este caso siguen la misma línea del caso isotrópico para un campo magnético perpendicular, reemplazando Λ_3 por $\tilde{\Lambda}_3$ en la Ec. 3.25. Como ejemplo y para una comparación posterior con las simulaciones disponibles [111], elegimos $D < 0$ y, por lo tanto, $\chi_0 = \pi/2$.

Si consideramos solo las dos primeras deformaciones en la expansión de la Ec. 3.3 podemos diagonalizar analíticamente el Hessiano (matriz M). Los valores propios positivos definen el campo crítico $B_2^{ZT}(\theta_B)$. Este campo se reduce a B_2^I (Ec. 3.28) cuando $\theta_B \rightarrow 0$. Por este motivo, interpretaremos a $B_2^{ZT}(\theta_B)$ como el campo crítico para la inestabilidad elíptica, y lo asociamos al campo crítico para la transición $\text{SkX} \rightarrow \text{H}$, como hicimos en la discusión del modelo isotrópico en el campo magnético transversal. Para los campos magnéticos debajo de este campo crítico, el skyrmión es inestable. El diagrama de fases (Fig. 3.4(c)) es similar al del caso de campo magnético perpendicular. En nuestro análisis, encontramos que $B_2^{ZT}(\theta_B)$ (para pequeños valores de θ_B) es una función creciente de θ_B . Por lo tanto, el efecto de la inclinación es una reducción de la región de estabilidad del skyrmión. Este resultado puede compararse con el diagrama de fases presentado en la Ref. [111]. En este trabajo se muestra el diagrama de fases para diferentes ángulos de inclinación. Los autores encuentran que los campos críticos para la transición $\text{SkX} \rightarrow \text{H}$ aumentan al inclinar el campo magnético. Este comportamiento está en acuerdo

cualitativo con nuestros hallazgos.

En la región de estabilidad determinamos la forma del skyrmión al minimizar la energía con respecto a R_1 y R_2 . En la Fig. 3.9(c) mostramos cómo la forma del skyrmión se ve afectada por una inclinación del campo magnético, donde la componente en el plano del campo magnético (\mathbf{B}_{\parallel}) está en la dirección $\hat{\mathbf{x}}$ ($\phi_B = 0$). Los contornos $m_z = \text{const.}$ son simétricos con respecto a una reflexión a lo largo de $\hat{\mathbf{y}}$ pero no a lo largo $\hat{\mathbf{x}}$. En este caso, la distorsión tiene lugar a lo largo de la dirección $\hat{\mathbf{y}}$, y para una orientación arbitraria de \mathbf{B}_{\parallel} la dirección de la deformación se determina mediante la Ec. 3.33. Esta figura puede compararse con la presentada en los resultados reportados recientemente [111, 116]. En estos trabajos, los autores muestran que, para un campo magnético transverso, el skyrmión tiene simetría axial. A medida que el campo magnético se inclina gradualmente desde el vector normal al plano del sistema, cada skyrmión pierde su simetría axial, Fig. 3.8. El skyrmión se estira a lo largo de la dirección perpendicular a la componente en el plano del campo magnético (\mathbf{B}_{\parallel}). Sin embargo, la forma del skyrmión no es elíptica. Esta asimetría genera una magnetización neta en la dirección de \mathbf{B}_{\parallel} , un resultado confirmado por nuestros cálculos.

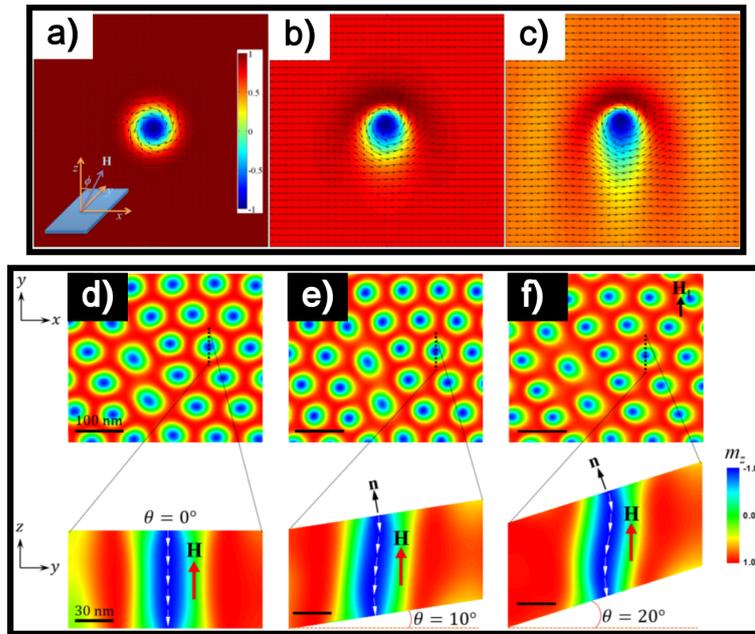


Figura 3.8: Efecto de la inclinación del campo magnético sobre la forma de los skyrmiones. Las figuras (a), (b) y (c) fueron extraídas de Ref. [111], las figuras (d), (e) y (f) fueron extraídas de Ref. [116] (Supp. Inf.).

Comparamos los resultados analíticos anteriores con un tratamiento numérico del problema para una expansión en 100 modos. El diagrama de fases para $\theta_B = 0,18$ ($\approx 10^\circ$) obtenido por medio de la diagonalización numérica del Hessiano se muestra en la Fig. 3.9(c). El color del fondo representa la región estable (naranja) e inestable (azul). La línea negra continua es la curva B_2^{ZT} (obtenida por la expansión analítica de dos modos) que define el límite de las regiones de estabilidad. Con respecto a la forma del skyrmión, presentamos los valores de R_n en la Fig. 3.6(b). Solo los dos primeros modos parecen ser relevantes en la expansión. Estos resultados respaldan el excelente acuerdo entre el

tratamiento analítico y numérico del problema.

En la Ref. [116] los autores realizaron simulaciones micromagnéticas con $\tilde{J} = 8,78$ pJ/m , $\tilde{D} = 1,58$ mJ/m^2 , una magnetización de saturación $M_0 = 384$ kA/m y $\tilde{H} = 4000$ Oe para reproducir sus datos experimentales. Estos parámetros se relacionan con los de nuestro modelo como sigue: $J = 2\tilde{J}/a^2$, $D = \tilde{D}/a$ y $B = \mu_0 M_0 \tilde{H}$, donde a es el parámetro de red (para FeGe $a = 4,70$ Å, ver, por ejemplo, Ref. [57]). Con este conjunto de valores ($D/J \approx 0,042$, $B/J \approx 0,0019$), los autores encuentran una región de skyrmiones compatible con los resultados obtenidos por nuestro método.

3.1.3.3. Acoplamiento magnetoeléctrico

El compuesto Cu_2OSeO_3 es un material multiferróico en el que un ordenamiento magnético particular induce una polarización ferroeléctrica [89, 112]. Se sabe que este material aislante aloja skyrmiones tipo Bloch. Debido a su naturaleza multiferróica, es posible crear, manipular y excitar los skyrmiones por medio de campos eléctricos [112, 114, 117], lo que lo convierte en un material interesante para aplicaciones tecnológicas como dispositivos de memoria y diodos de microondas [112]. En este material, la interacción entre el campo eléctrico y la polarización eléctrica está dada por

$$E_{ME} = -\mathbf{E} \cdot \sum_i \mathbf{P}_i, \quad (3.34)$$

donde la polarización local está relacionada con el campo de espines de la siguiente manera [112–114]:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = (m_z(\mathbf{r})m_y(\mathbf{r}), m_z(\mathbf{r})m_x(\mathbf{r}), m_y(\mathbf{r})m_x(\mathbf{r})). \quad (3.35)$$

Vamos a analizar la estabilidad de los skyrmiones bajo el efecto de un campo eléctrico externo $\mathbf{E} = E(\sin(\gamma)\cos(\alpha), \sin(\gamma)\sin(\alpha), \cos(\gamma))$. Dentro de nuestro marco, el término magnetoeléctrico se expresa como sigue (ver Apéndice A):

$$E^{ME} = E_0^E + \sum_n L_n^E R_n + \sum_{n,m=1}^{\infty} M_{nm}^E R_n R_m. \quad (3.36)$$

Consideraremos dos casos relevantes: (1) campo eléctrico transversal ($\gamma = 0$), que tiene efectos sobre la estabilidad de los skyrmiones, y (2) campo eléctrico en el plano ($\gamma = \pi/2$), donde la estabilidad de los skyrmiones no se ve afectada pero la forma de los skyrmiones puede ser controlada por el campo eléctrico.

■ 1. Campo eléctrico transversal

En un campo eléctrico transversal ($\gamma = 0$) se obtiene el mínimo de energía cuando β_n satisface las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \chi_0 + \frac{\pi}{4}, \\ \beta_{n+2} &= 2\chi_0 + \beta_n - \frac{3\pi}{2}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

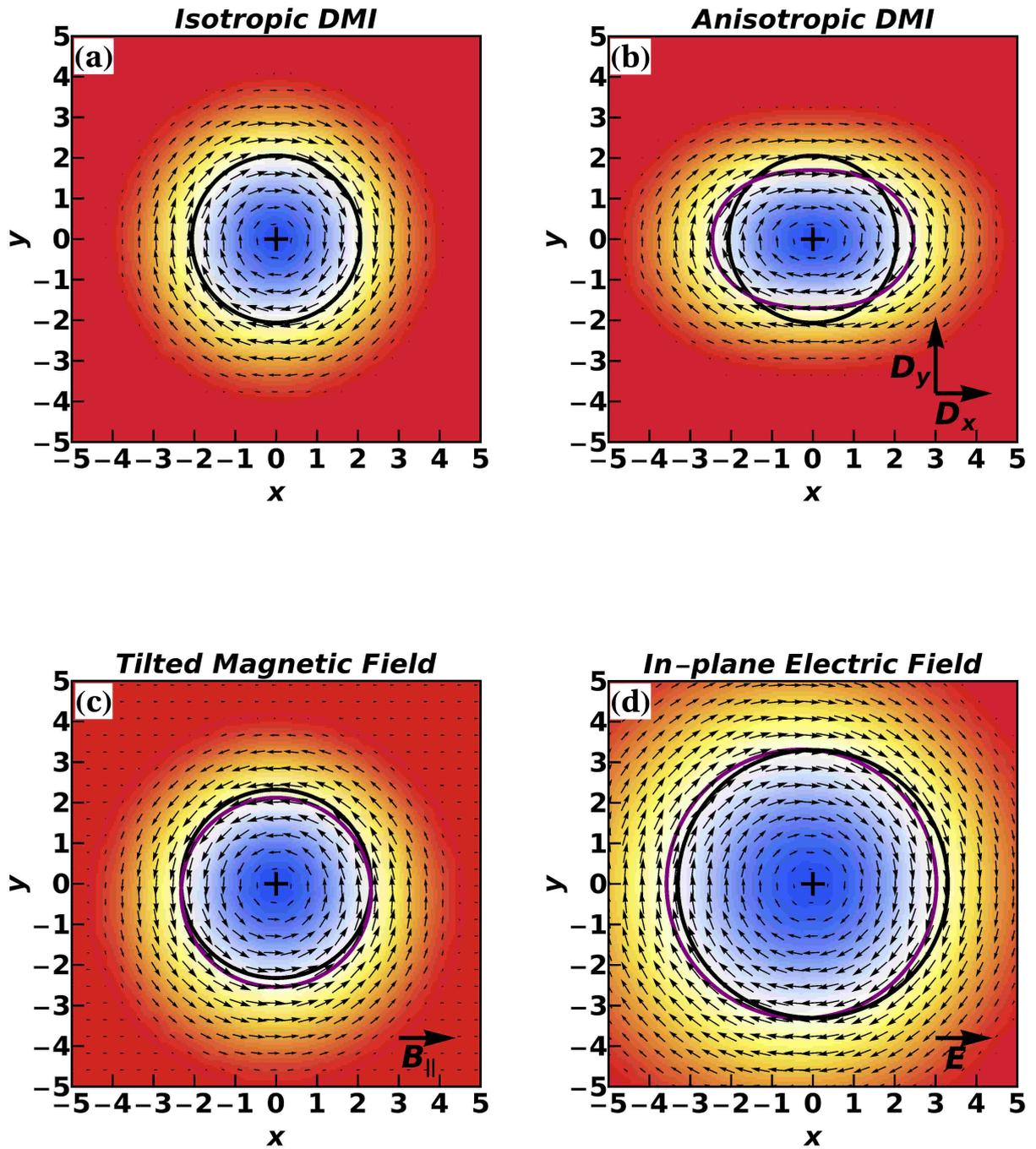


Figura 3.9: En estas imágenes representamos las deformaciones del skyrmión a través de las diferentes perturbaciones. Las curvas representan los contornos en los que la componente m_z se mantiene constante ($m_z = 0$). La curva negra es el contorno de la aproximación circular de skyrmion mientras que la curva violeta es para el skyrmión distorsionado. La cruz negra representa la posición del centro del skyrmión. (a) Un skyrmión circular para el modelo isotrópico ($D/J = 0,78$) en un campo magnético transversal ($B/J = 0,5$). (b) Un perfil elíptico para el modelo con interacción DM anisotrópica ($D_y/J = 1$, $D_x/J = 0,56$ y $B/J = 0,5$). (c) Una distorsión del skyrmión para un campo magnético inclinado ($\theta_B = 0,18$, $D/J = 0,8$ y $B/J = 0,45$). (d) Una distorsión del skyrmión en un campo eléctrico en el plano ($D/J = 0,4$, $B/J = 0,16$ y $E/J = 0,15$).

Es importante tener en cuenta que un campo eléctrico transversal determina solo β_1 , mientras que β_2 permanece como un parámetro indeterminado. El resto de los parámetros β_n se determinan a través de la Ec. 3.37. En este caso el término magnetoeléctrico toma la forma:

$$E^{EP} = \sum_{n,m=1}^{\infty} \tilde{M}_{nm}^{EP} R_n R_m. \quad (3.38)$$

Vamos a considerar solo las primeras cuatro deformaciones tal como hicimos en los modelos anteriores. En esta aproximación podemos encontrar expresiones analíticas para los campos críticos. En este caso, dos campos críticos, B_1^{MEP} y B_2^{MEP} , definen los límites entre las regiones estables e inestables (Fig. 3.4(d)). En el límite $E \rightarrow 0$ tenemos $B_1^{MEP} \rightarrow B_1^I$ y $B_2^{MEP} \rightarrow B_2^I$. Por lo tanto, el diagrama de fases cambia como se muestra en la Fig. 3.4(d). Debajo de B_1^{MEP} , la deformación cardiódica (R_1)⁴ promueve una inestabilidad en la forma del skyrmión y, como en los casos anteriores, debajo de B_2^{MEP} surge la inestabilidad elíptica. Vemos que el campo crítico B_1^{MEP} tiene una fuerte dependencia con campo eléctrico externo. Esto permite la destrucción de un skyrmión por medio de un campo eléctrico. Por ejemplo si nos ubicamos en el punto marcado con una cruz ($D/J \approx 0,4$ y $B/J \approx 0,075$) en la Fig. 3.4(d), y creamos un skyrmión en ausencia del campo eléctrico, tendremos un skyrmión aislado estable. Luego, si encendemos el campo eléctrico $E/J = 0,15$, el punto anterior se vuelve inestable y el skyrmión puede ser destruido. Por lo tanto, nuestros resultados muestran que la estabilidad de un skyrmión podría ser controlada por medio de un campo eléctrico externo. Este fenómeno es bien conocido en sistemas ferróicos que alojan skyrmiones [113, 114]. Sin embargo, nuestros resultados no son directamente comparables a aquellos porque el mecanismo experimental subyacente a la creación (destrucción) de un skyrmión involucra campos eléctricos localizados.

De la Ec. 3.38 es fácil ver que la forma del skyrmión será circular debido a la ausencia de términos lineales en R_n ($L_n^{EP} = 0$). Los resultados numéricos (con 100 modos) para el diagrama de fases (Fig. 3.4(d)) son consistentes con los resultados analíticos para B_1^{MEP} y B_2^{MEP} .

Para Cu_2OSeO_3 , las simulaciones con $J = 3\text{meV}$ y $D/J = 0,09$ reproducen los resultados experimentales [114]. La red de skyrmiones emerge para campos magnéticos intermedios $1,875 \times 10^{-3} < |B/J| < 6,3 \times 10^{-3}$ y el autor fijó un valor de $B/J = 6,3 \times 10^{-3}$. De acuerdo con nuestros cálculos, el skyrmión es estable para este campo magnético, nuevamente encontrando un acuerdo con los resultados observados.

■ 2. Campo eléctrico en el plano

En este caso, $\gamma = \pi/2$ y los valores para β_n son:

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{3\pi}{2} + \chi_0 + \alpha, \\ \beta_{n+1} &= \beta_n + \chi_0 + \alpha - \frac{3\pi}{2}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

⁴La llamamos de esta forma porque por medio de esta distorsión es posible representar la curva correspondiente a una cardioide cuya ecuación es $r(\theta) = a(1 + \cos(\theta))$.

El término magnetoeléctrico toma la forma:

$$E^{EI} = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{L}_n^{EI} R_n + \sum_{n,m=1}^{\infty} \tilde{M}_{nm}^{EI} R_n R_m. \quad (3.40)$$

En lugar de resolver el problema para la serie completa, consideramos solo las dos primeras deformaciones R_1 y R_2 . En esta aproximación, el diagrama de fases es el mismo que en el modelo isotrópico en ausencia del término magnetoeléctrico. Este resultado se confirma numéricamente como en los casos anteriores. Sin embargo, la forma del skyrmión cambia debido a la presencia de un término lineal en R_1 . El hallazgo más interesante es que R_1 es mayor que R_2 (ver Fig. 3.6(c)). Por lo tanto, para campos eléctricos pequeños, R_1 es pequeño, y la deformación del skyrmión se puede ver como una traslación del contorno en que m_z es constante, mientras que el centro del skyrmión permanece fijo en el origen de las coordenadas. Esto revela que la forma del skyrmión puede ser manipulada por el campo eléctrico externo. La dirección de la distorsión está determinada por las Ecs. 3.39. En particular, en la Fig. 3.9(d), mostramos cómo es deformado el skyrmión por un campo eléctrico en el plano en la dirección $\hat{\mathbf{x}}$ ($\alpha = 0$) y la deformación ocurre en la dirección opuesta (contorno violeta). Esta deformación es consistente con la presencia de una polarización eléctrica en la dirección del campo eléctrico.

3.2. Redes de skyrmiones

Si bien hasta aquí solo hemos considerado estados metaestables en los que skyrmiones aislados pueden ser encontrados en cierta región del espacio de parámetros, en general el estado de equilibrio termodinámico (a baja temperatura) corresponde a una red de skyrmiones. Esta red se asemeja a la red de vórtices en un superconductor tipo II [7, 115, 118, 119].

En esta sección estudiaremos el diagrama de fases de un sistema bidimensional de espines en busca de una fase de red de skyrmiones. El sistema que estudiaremos está descrito por un Hamiltoniano de espines:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D}_{i,j} \cdot (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_j) - \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{m}_i, \quad (3.41)$$

donde los momentos magnéticos (clásicos, $|\mathbf{m}_i| = 1$) se ubican sobre una red triangular. El primer término del Hamiltoniano corresponde a la interacción (entre primeros vecinos) de intercambio (ferromagnética, $J > 0$). El segundo término también involucra a los primeros vecinos y es la interacción de DM. Las características de esta interacción están determinadas por el vector $\mathbf{D}_{i,j}$ que consideraremos de módulo fijo $|\mathbf{D}_{i,j}| = D$ y paralelo a la dirección de los acoplamientos entre los iones, $\hat{\mathbf{D}}_{i,j} \parallel \hat{\mathbf{r}}_{i,j}$ como se muestra en la Fig. 3.10.

En las próximas secciones realizaremos un tratamiento variacional de este problema para estudiar sus propiedades a $T = 0$ y compararemos estos resultados con simulaciones de Monte Carlo a $T \approx 0$. Finalmente discutiremos el alcance de estos resultados al contrastarlos con sistemas magnéticos reales en los que el espesor de una muestra juega un rol

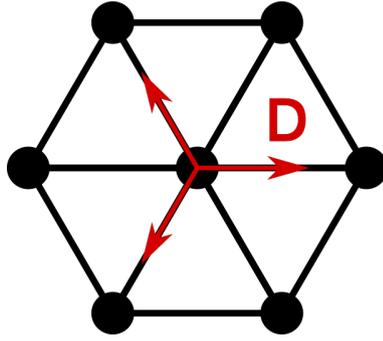


Figura 3.10: Representación de los vectores de Dzyaloshinskii-Moriya ($\mathbf{D}_{i,j} = -\mathbf{D}_{j,i}$) entre primeros vecinos de una red triangular.

muy importante en la estabilidad de las redes de skyrmiones.

3.3. Teoría efectiva y enfoque variacional para $T = 0$

La teoría efectiva (límite al continuo) del modelo en la Ec. 3.41 se puede obtener por medio de la expansión en gradientes utilizada en la Sec. 3.1.3.1 de este capítulo,

$$\mathcal{H} = \frac{3J}{4} [(\partial_x \mathbf{m})^2 + (\partial_y \mathbf{m})^2] - \frac{3D}{2} [\mathbf{m} \cdot (\nabla \times \mathbf{m})] - B_z m_z. \quad (3.42)$$

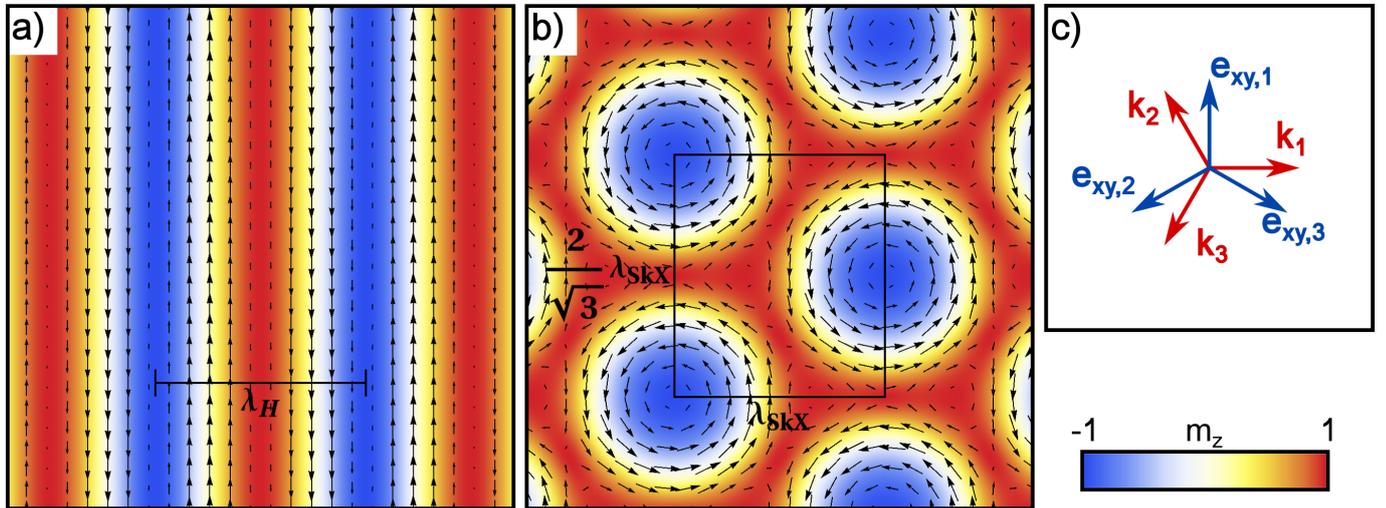


Figura 3.11: (a) Representación del campo de espines para una fase helicoidal (H), (b) representación de una red de skyrmiones (SkX), (c) definición de los vectores de propagación \mathbf{k}_i (rojo) y de los vectores $\hat{\mathbf{e}}_{xy,i}$ (azul). En los gráficos del campo de espines, la componente xy se representa mediante flechas y la componente z mediante escala de colores.

Estudiaremos las fases de este modelo por medio de un enfoque variacional que en los capítulos siguientes será extendido al estudio de redes de skyrmiones en sistemas

antiferromagnéticos. En este enfoque el diagrama de fases se obtiene comparando las energías de cada una de las fases consideradas. Cada una de estas fases es representada por un determinado ansatz para la configuración de espines. Las tres fases que consideraremos a $T = 0$ son la fase helicoidal (H), red de skyrmiones (SkX) y ferromagnética (FM) (ver Fig. 3.11). Los correspondientes ansatz son:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_H(\mathbf{r}) &= \frac{1}{n_H} \left\{ \left[I_{xy} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_H} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right) \right] \hat{\mathbf{e}}_{xy} + \left[I_z \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_H} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right) + m_z \right] \hat{\mathbf{e}}_z \right\}, \\ \mathbf{m}_{SkX}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{n_{SkX}} \left\{ \left[I_{xy} \sum_{i=1}^3 \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_{SkX}} \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} + \theta_i\right) \hat{\mathbf{e}}_{xy,i} \right] + \left[I_z \sum_{i=1}^3 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_{SkX}} \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} + \theta_i\right) + m_z \right] \hat{\mathbf{e}}_z \right\}, \\ \mathbf{m}_{FM}(\mathbf{r}) &= (0, 0, 1). \end{aligned} \quad (3.43)$$

En las expresiones anteriores las funciones n_H y n_{SkX} son introducidas para fijar la norma del espín y las constantes θ_i satisfacen $\cos(\theta_1 + \theta_2 + \theta_3) = -1$ [120]. Los versores \mathbf{k}_i caracterizan a una modulación magnética que se propaga en la dirección \mathbf{k}_i . El vector $\hat{\mathbf{e}}_z$ es el versor que apunta en la dirección perpendicular al plano del sistema, los versores $\hat{\mathbf{e}}_{xy,i}$ son paralelos al plano del sistema y satisfacen las condiciones $\hat{\mathbf{e}}_{xy,i} \cdot \mathbf{k}_i = 0$, $\hat{\mathbf{e}}_{xy,i} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{xy,j} = -1/2$ para $i \neq j$ (ver Fig. 3.11 (c)). Los magnitudes I_{xy} , I_z , m_z y λ_{SkX} (o λ_H , dependiendo del caso) son parámetros respecto a los cuales minimizar la energía de dichas configuraciones. Dado que estamos considerando sistemas extensos (infinitos) y configuraciones que tienen cierta periodicidad, es conveniente evaluar la densidad superficial de energía:

$$E = \frac{1}{A_{c.u.}} \int_{A_{c.u.}} d^2\mathbf{r} \mathcal{H}, \quad (3.44)$$

donde el área de la celda unidad ($A_{c.u.}$), para la red de skyrmiones, la definimos como se muestra en la Fig. 3.11 (b), $A_{c.u.} = \frac{2}{\sqrt{3}} \lambda_{SkX}^2$. Para el caso de la fase helicoidal (como la representada en la Fig. 3.11 (a)) $A_{c.u.} = \lambda_y \lambda_H$, con λ_y arbitrario. Finalmente para la fase FM podemos elegir $A_{c.u.}$ arbitrariamente.

Para minimizar la energía utilizaremos el método de Nelder-Mead [121, 122] que se basa en la construcción de simplexes en un espacio de cuatro dimensiones en este caso (ver Apéndice B).

En la Fig. 3.12 se representa la diferencia de energías entre cada uno de los estados considerados y la energía del estado ferromagnético como función de B/J y para $D/J = 0,7$. Este análisis muestra que para valores pequeños de campo magnético ($B/J \lesssim 0,18$) la fase H es estable mientras que en el extremo opuesto ($B/J \gtrsim 0,54$) encontramos la fase FM. Es notable que, para una región de campos intermedios ($0,18 \lesssim B/J \lesssim 0,54$), la fase SkX es estable [115]. En las siguientes secciones ampliaremos el análisis anterior para estudiar algunas de las propiedades de este sistema y compararemos estos resultados con simulaciones de Monte Carlo.

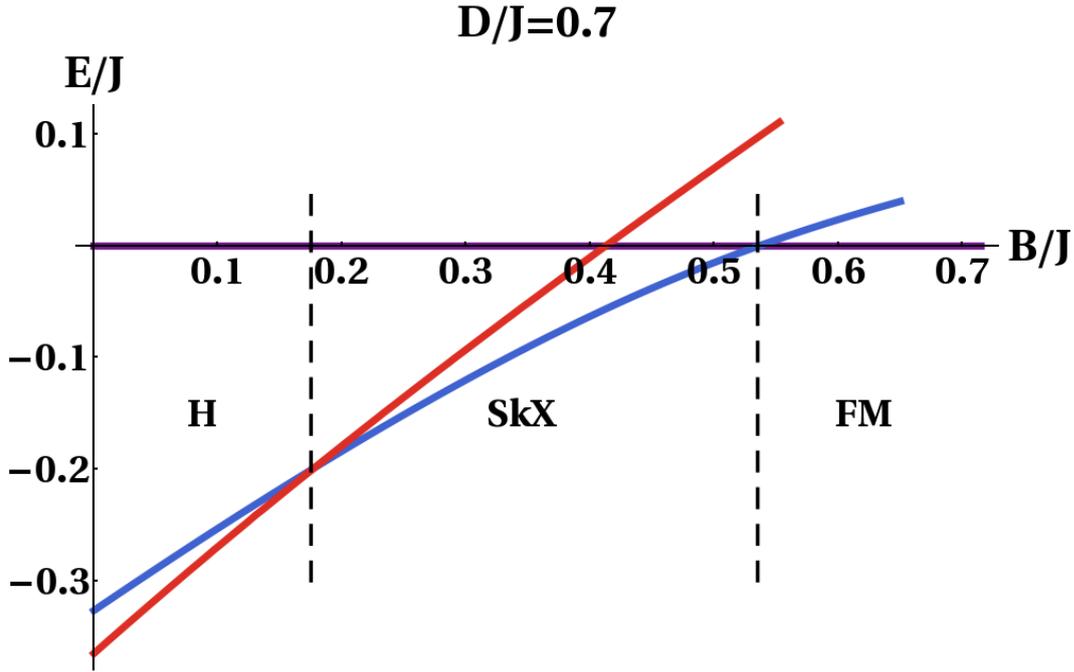


Figura 3.12: Energía de cada una de las fases en función del campo magnético (B/J) para $D/J = 0,7$: fase helicoidal (H, curva roja), red de skyrmiones (SkX, curva azul) y fase ferromagnética (FM, curva violeta).

3.4. Simulaciones de Monte Carlo para bajas temperaturas

Con el objetivo de explorar el alcance del enfoque anterior, y extender el análisis para considerar efectos térmicos, realizamos simulaciones de Monte Carlo a baja temperatura para el modelo de la Ec. 3.41. Los sistemas estudiados son de tamaño $L \times L$ (con $L = 36, 48$ y 60) en el que se han implementado condiciones de contorno periódicas.

3.4.1. Carga topológica

Como hemos señalado en la Sec. 2.3.6 una característica importante de los skyrmiones es su naturaleza topológica, caracterizada por una carga topológica (o invariante topológico) definida como

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{m} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial y} \right) d^2 \mathbf{r}, \quad (3.45)$$

que representa el número de skyrmiones que se encuentran en el sistema.

Al considerar sistemas discretos es importante disponer de la definición de una cantidad que de cuenta de esta propiedad topológica. Veremos como puede hacerse esto para sistemas en los que los iones magnéticos se ubican sobre una red cuadrada y triangular.

Consideremos la siguiente definición para una red cuadrada de espines:

$$q_i = \mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k). \quad (3.46)$$

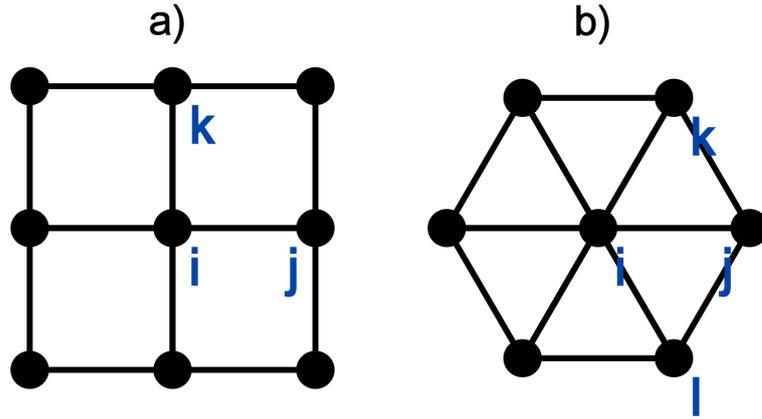


Figura 3.13: Espines involucrados en las definiciones de: (a) q_i para la red cuadrada (Ec. 3.46) y (b) \tilde{q}_i para la red triangular (Ec. 3.50).

Esta es una magnitud escalar, local, que involucra a los espines i , j y k (como se muestran en la Fig. 3.13 (a)) de una dada configuración. Bajo la hipótesis de variaciones suaves del campo de espines podemos realizar las siguientes expansiones

$$\begin{aligned}\mathbf{m}_j &\approx \mathbf{m}_i + a\partial_x\mathbf{m}_i + \frac{a^2}{2}\partial_x^2\mathbf{m}_i + \dots, \\ \mathbf{m}_k &\approx \mathbf{m}_i + a\partial_y\mathbf{m}_i + \frac{a^2}{2}\partial_y^2\mathbf{m}_i + \dots.\end{aligned}\quad (3.47)$$

Si introducimos estos desarrollos en la Ec. 3.46 obtenemos que, hasta segundo orden en a , q_i está dado por:

$$q_i \approx a^2\mathbf{m}_i \cdot [(\partial_x\mathbf{m}_i) \times (\partial_y\mathbf{m}_i)]. \quad (3.48)$$

Como podemos ver, las contribuciones de segundo orden en el desarrollo anterior provienen de los términos de primer orden en las expansiones de la Ec. 3.47.

Por lo tanto en el límite continuo

$$\begin{aligned}\sum_i a^2 &\rightarrow \int d^2\mathbf{r}, \\ Q = \frac{1}{4\pi} \sum_i \{\mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k)\} &\rightarrow \mathcal{Q} = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{m} \cdot \left(\frac{\partial\mathbf{m}}{\partial x} \times \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial y} \right) d^2\mathbf{r},\end{aligned}\quad (3.49)$$

donde las sumas se extienden a todos los sitios del sistema.

Ahora extenderemos este resultado a la red triangular. Consideremos la siguiente definición para una red triangular de espines:

$$\tilde{q}_i = \mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k) + \mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{m}_l \times \mathbf{m}_j), \quad (3.50)$$

en donde los espines i , j , k y l se ubican en los sitios representados en la Fig. 3.13 (b). Realizamos los desarrollos de los espines \mathbf{m}_j , \mathbf{m}_k y \mathbf{m}_l , pero solo hasta primer orden en a porque, como vimos antes, solo estos términos son los que conducen a un desarrollo hasta

segundo orden (en a) de \tilde{q}_i :

$$\begin{aligned}\mathbf{m}_j &\approx \mathbf{m}_i + a(\hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{m}_i + \dots, \\ \mathbf{m}_k &\approx \mathbf{m}_i + a(\hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla)\mathbf{m}_i + \dots, \\ \mathbf{m}_l &\approx \mathbf{m}_i + a(\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla)\mathbf{m}_i + \dots,\end{aligned}\tag{3.51}$$

donde $\hat{\mathbf{u}} = (1/2, \sqrt{3}/2)$ y $\hat{\mathbf{v}} = (1/2, -\sqrt{3}/2)$. Si introducimos estos desarrollos en la expresión Ec. 3.50 encontramos \tilde{q}_i hasta segundo orden en a

$$\tilde{q}_i \approx a^2(\sqrt{3})\mathbf{m}_i \cdot [(\partial_x \mathbf{m}_i) \times (\partial_y \mathbf{m}_i)].\tag{3.52}$$

Por lo tanto en el límite continuo

$$\sum_i a^2 \frac{\sqrt{3}}{2} \rightarrow \int d^2 \mathbf{r},\tag{3.53}$$

$$Q = \frac{1}{8\pi} \sum_i \{\mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k) + \mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{m}_l \times \mathbf{m}_j)\} \rightarrow \mathcal{Q} = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{m} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial y} \right) d^2 \mathbf{r},$$

donde las sumas se extienden a todos los sitios del sistema.

En la Fig. 3.14 se muestra la carga topológica Q (Ec. 3.53) como función del campo magnético a $T \approx 0$. Podemos distinguir dos regiones en las que $Q \approx 0$ y corresponden a la fase H (de bajo campo magnético) (Fig. 3.14, (a)) y la fase FM (elevado campo magnético) (Fig. 3.14, (f)). Pueden distinguirse además tres regiones en las que $Q \neq 0$. La región de campo magnético bajo en la que se observa como emergen los skyrmiones a partir de las hélices (Fig. 3.14, (b)). En la región de campo intermedio encontramos redes de skyrmiones (Fig. 3.14 (c)) con una carga topológica aproximadamente constante. Puede observarse en la Fig. 3.14 (b) que la transición de la fase SkX a la fase H se lleva a cabo por el proceso de estiramiento de los skyrmiones que hemos mencionado en la Sec. 3.1.3.1. Finalmente una región de campo magnético elevado en la que identificamos skyrmiones aislados (Sk, Fig. 3.14 (d) y (e))⁵. En las regiones en las que se encuentran skyrmiones, la carga topológica da cuenta del número de skyrmiones presentes en el sistema⁶.

Las tres fases que nos interesan se manifiestan también en la magnetización del sistema. Como puede observarse en la Fig. 3.15 la magnetización consta de tres tramos y revela una sucesión de fases H \rightarrow SkX (Sk) \rightarrow FM al incrementar el campo magnético. Podemos notar que el enfoque variacional y los resultados de las simulaciones de Monte Carlo son consistentes en la secuencia de fases mencionada anteriormente así como en el comportamiento de la magnetización.

⁵Esta fase intermedia en la que se identifican skyrmiones aislados se la conoce como gas de skyrmiones y ha sido extensamente estudiada en sistemas finitos [57].

⁶En la práctica Q (definido en Ec. 3.46 o Ec. 3.53) y el número de skyrmiones N_{Sk} en general difieren en un factor $N_{Sk} = \alpha Q$ [57]. En nuestro caso este factor es $\alpha \approx 1,14$.

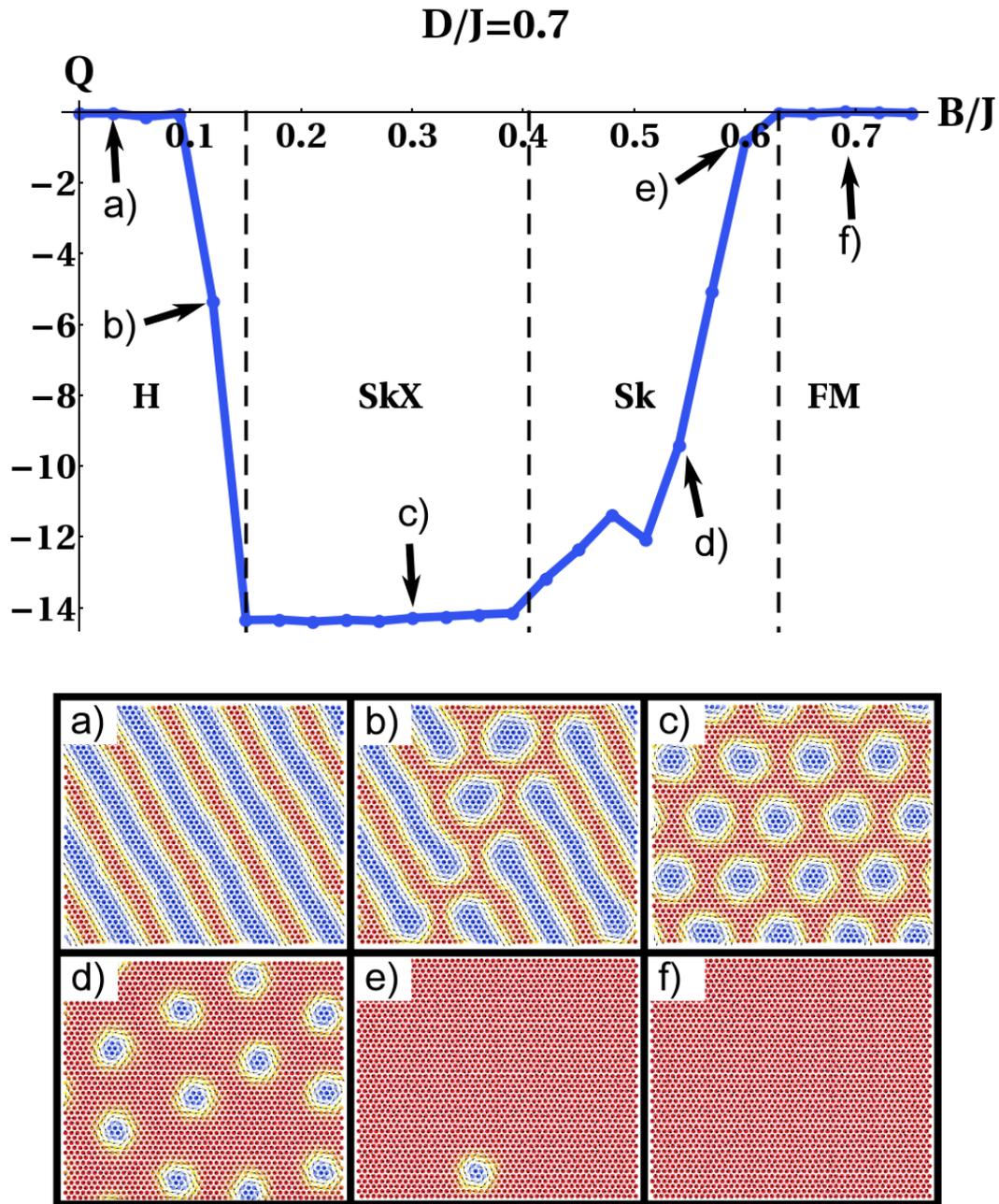


Figura 3.14: Panel superior: carga topológica en función del campo magnético (para $T/J \approx 10^{-2}$). Panel inferior: representación del campo de espines para distintos valores de campo magnético, (a) $B/J = 0,03$, (b) $B/J = 0,12$, (c) $B/J = 0,30$, (d) $B/J = 0,54$, (e) $B/J = 0,60$ y (f) $B/J = 0,60$.

3.4.2. Diagrama de fases

Podemos obtener el diagrama de fases de este sistema por medio del enfoque variacional repitiendo el procedimiento realizado en la Sec. 3.3 para distintos valores de D/J . Esto mismo puede hacerse recurriendo a las simulaciones de Monte Carlo sobre este sistema a baja temperatura. En este último caso determinamos el diagrama de fases a partir del

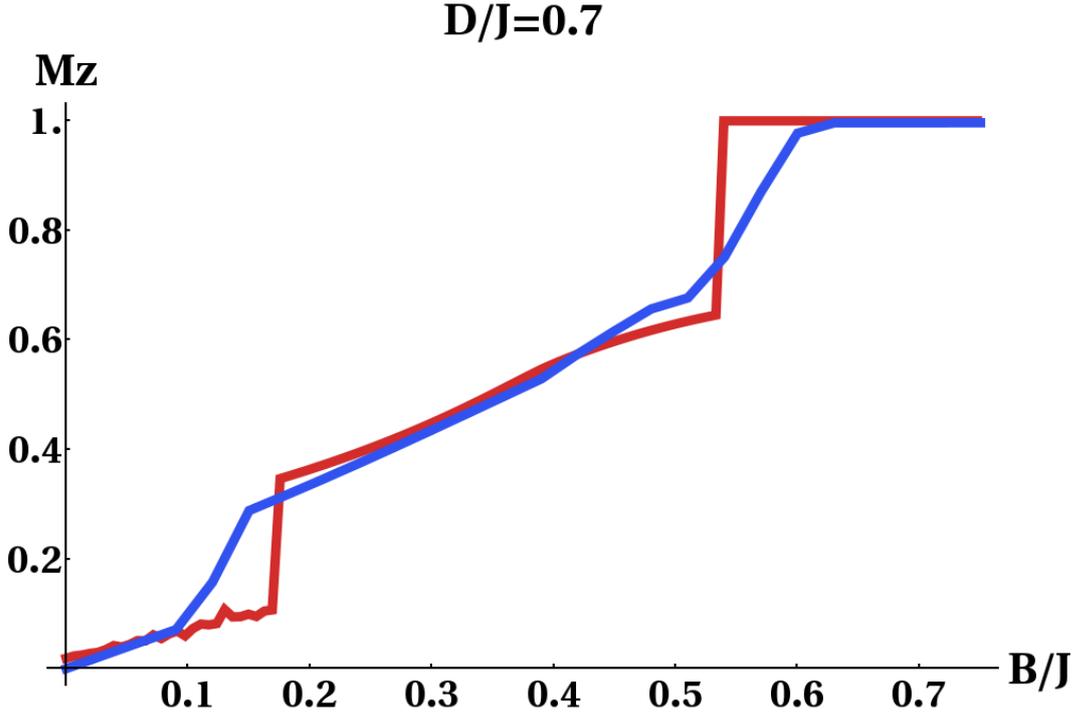


Figura 3.15: Magnetización como función del campo magnético para $D/J = 0,7$. La curva roja es la magnetización obtenida por medio del enfoque variacional mientras que la azul es la magnetización obtenida por simulaciones de Monte Carlo a baja temperatura ($T/J \approx 0,017$).

análisis de la carga topológica, la magnetización y la configuración de espines. En la Fig. 3.16 se muestran los diagramas de fases obtenido por los dos enfoques. Las distintas fases en estos diagramas están separadas por arcos parabólicos en los que $B_c \propto D^2$. Los campos críticos que se obtienen de acuerdo al análisis variacional ⁷ para la transición $H \rightarrow \text{SkX}$ (B_{c1}^Δ) y la transición $\text{SkX} \rightarrow \text{FM}$ (B_{c2}^Δ) son:

$$B_{c1}^\Delta = 0,361 \frac{D^2}{J}, \quad (3.54)$$

$$B_{c2}^\Delta = 1,095 \frac{D^2}{J}. \quad (3.55)$$

Mientras que los obtenidos a partir de las simulaciones de Monte Carlo para las transiciones $H \rightarrow \text{SkX}$ (B_{c1}^Δ), $\text{SkX} \rightarrow \text{Sk}$ (B_{c1}^\square) y la transición $\text{Sk} \rightarrow \text{FM}$ (B_{c2}^Δ) son:

⁷Para una red cuadrada bidimensional el Hamiltoniano efectivo está dado por $\mathcal{H} = (J/2) ((\partial_x \mathbf{m})^2 + (\partial_y \mathbf{m})^2) - D \mathbf{m} \cdot (\nabla \times \mathbf{m}) - B_z m_z$ (ver Ec. 3.22). Los campos críticos que se obtienen (a $T = 0$) para este sistema son $B_{c1}^\square = 0,23 \frac{D^2}{J}$ y $B_{c2}^\square = 0,79 \frac{D^2}{J}$. Podemos notar que existe un factor $\sim 3/2$ entre los campos críticos de ambos modelos ($B_c^\Delta = (3/2) B_c^\square$). Este factor $3/2$, que se puede identificar en la teoría efectiva para la red triangular (Ec. 3.42), da cuenta de la relación entre los números de coordinación de cada sistema $N_c^\Delta = (3/2) N_c^\square$.

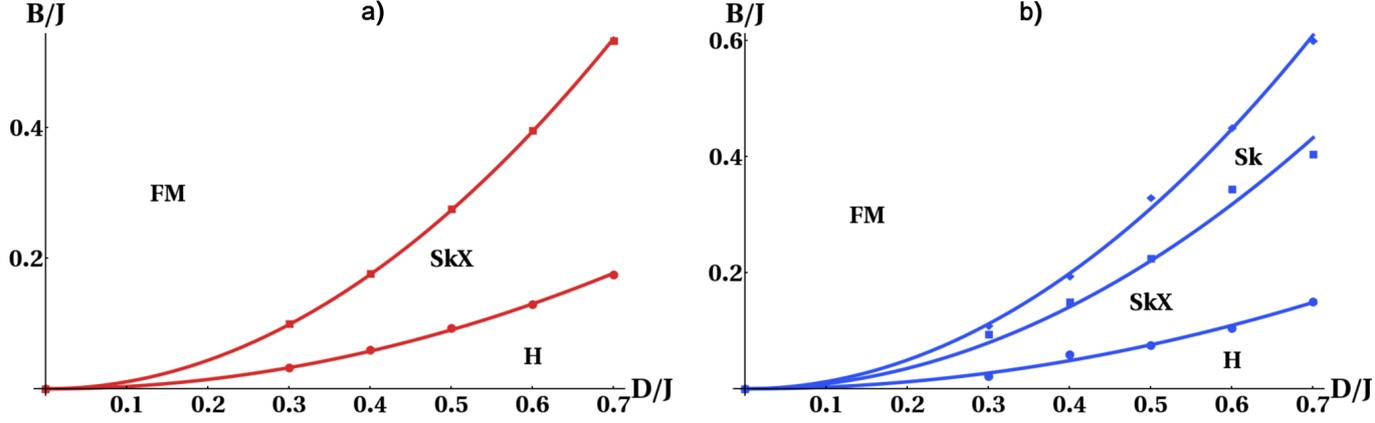


Figura 3.16: Diagrama de fases obtenido por: (a) el enfoque variacional y (b) simulaciones de Monte Carlo a $T/J = 0,017$.

$$B_{c1}^{\Delta} = 0,304 \frac{D^2}{J}, \quad (3.56)$$

$$B_{ci}^{\Delta} = 0,883 \frac{D^2}{J}, \quad (3.57)$$

$$B_{c2}^{\Delta} = 1,244 \frac{D^2}{J}. \quad (3.58)$$

3.5. El rol de la dimensionalidad

En un sistema real la estabilidad de las redes de skyrmiones está determinada por las características de la muestra en estudio. Hasta aquí nos hemos enfocado en sistemas bidimensionales en los que los iones magnéticos interactúan por medio de una interacción de intercambio y DM además de estar acoplados a un campo magnético externo. Sin embargo debemos resaltar la relevancia de dos elementos que son fundamentales en la estabilidad de redes de skyrmiones: 1) la dimensionalidad del sistema (relacionada al espesor de una muestra) y 2) la presencia de anisotropía uniaxial. Dedicaremos esta sección a discutir en detalle el primer punto para finalmente analizar los casos en los que la anisotropía uniaxial es necesaria para estabilizar redes de skyrmiones.

Por medio de experimentos de dispersión de neutrones en muestras de MnSi [12] y $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [123] se pudo identificar la “fase A” presente en estos sistemas con una fase de red de skyrmiones. Los análisis teóricos y resultados experimentales en sistemas tridimensionales revelan que las fluctuaciones térmicas estabilizan redes de skyrmiones en alguna región limitada del diagrama de fases $T - B$ (cerca a la temperatura crítica), mientras que el estado cónico, con un vector de propagación \mathbf{k} paralelo al campo magnético (Fig. 3.17), es más estable en la mayor parte del diagrama de fases [12].

Sin embargo una muestra puede considerarse bidimensional en tanto el espesor de la misma sea menor que la longitud de onda del estado helicoidal. En estas condiciones el vector

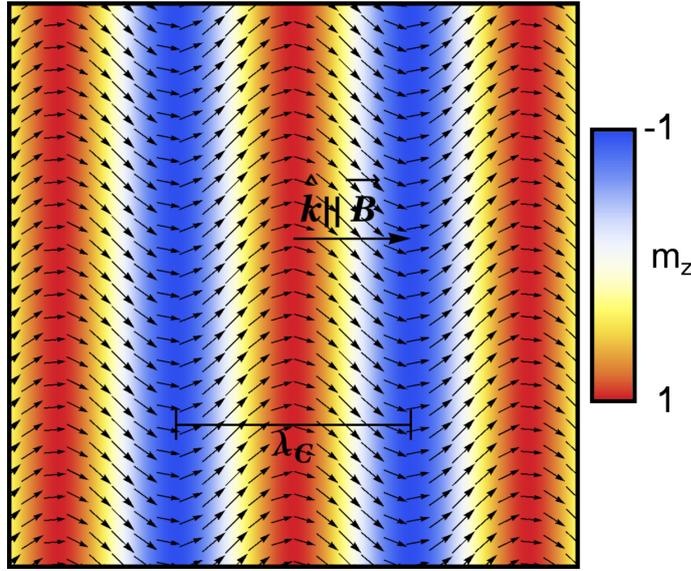


Figura 3.17: Representación esquemática de la fase cónica con un vector de propagación $\hat{\mathbf{k}}$ paralelo al campo magnético \mathbf{B} . Las flechas representan la componente xy del espín y la escala de colores representa la componente z .

de propagación \mathbf{k} está confinado en el plano de la muestra, por lo tanto el estado cónico no es estabilizado cuando el campo magnético es perpendicular al plano de la muestra. Como consecuencia de esto la fase de red de skyrmiones puede ser estabilizada con mayor facilidad, incluso a $T = 0$.

En Ref. [20] experimentos realizados en láminas delgadas de $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{Si}$ (con un espesor $t < 50$ nm, mientras que el período del estado helicoidal es $\lambda \sim 90$ nm) y simulaciones de Monte Carlo sobre sistemas bidimensionales, mostraron que, en efecto, la red de skyrmiones puede ser estabilizada por medio de un campo magnético perpendicular al plano de la muestra, incluso a temperaturas bajas $T \approx 5\text{K}$ (mucho menor que la temperatura crítica $T_c = 40\text{K}$). En trabajos subsiguientes, en los que se estudiaron los materiales FeGe [124] y MnSi [125], los autores analizaron específicamente el efecto del espesor de una muestra en la estabilidad de las redes de skyrmiones. Una de las conclusiones más importantes de estos trabajos es que cuanto más delgada es una lámina ($t < \lambda_H$) más amplia es la región de estabilidad de la fase SkX en una configuración en la que el campo magnético es perpendicular a la muestra. Esto puede observarse en la Fig. 3.18 en la que se estudiaron láminas (“wedge-shaped”) de MnSi (Fig. 3.18 (a)) y FeGe (Fig. 3.18 (b)).

Por su parte, los estudios analíticos y numéricos revelan que en un sistema bidimensional los skyrmiones pueden emerger formando una red hexagonal por debajo de cierto campo crítico y permanecer como un estado de equilibrio termodinámico en una amplia región de campo magnético e incluso a $T = 0$ [9, 126]. Esto no ocurre en helimagnetos tridimensionales (“bulk”) en donde las modulaciones magnéticas unidimensionales a lo largo del campo magnético aplicado (fase cónica) son estables en la mayor parte del diagrama de fases [127], y las redes de skyrmiones pueden existir a $T = 0$ solo como estados metaestables [21, 128]. Sin embargo, de acuerdo a observaciones recientes [129–132], debemos resaltar que es posible encontrar un cristal de skyrmiones a $T \approx 0$ aún cuando el sistema en estudio se trata de láminas delgadas pero de un espesor mayor que el

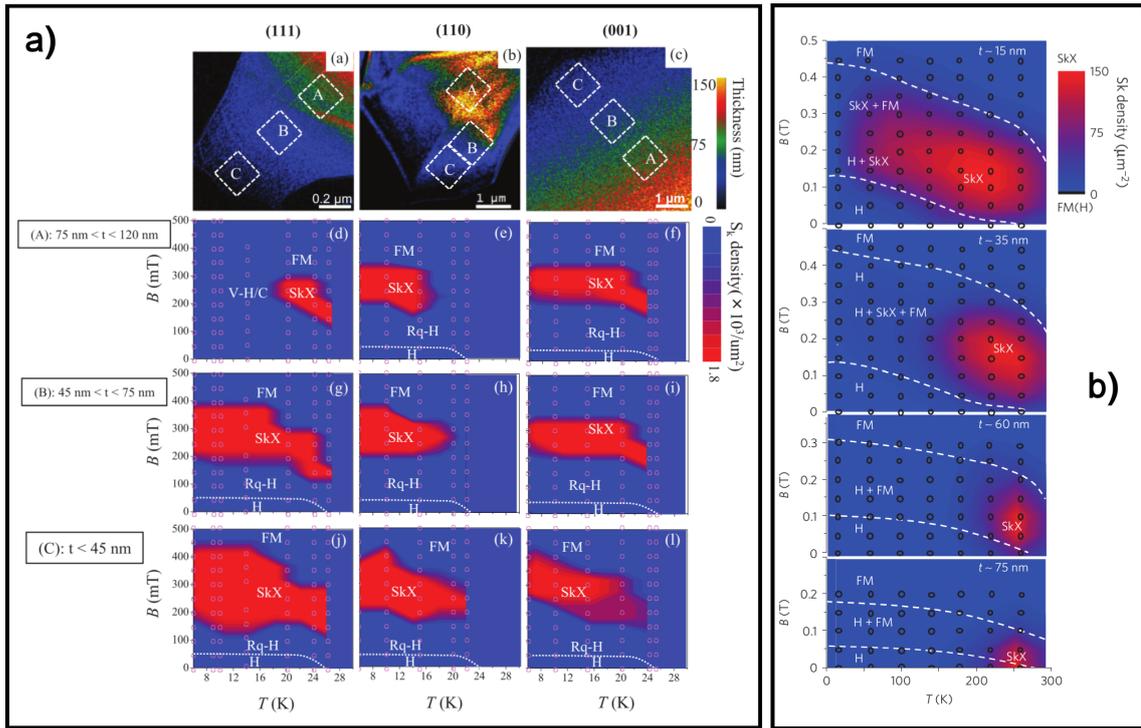


Figura 3.18: Dependencia del diagrama de fases magnético ($B - T$) con el espesor de la muestra: (a) experimentos realizados láminas de monocristales de MnSi, con orientaciones (111), (110) y (001) (figura extraída de Ref. [125]), (b) experimentos realizados en láminas policristalinas de FeGe (figura extraída de Ref. [124]). En todos los casos las muestras fueron preparadas para darles un gradiente de espesores (“wedge-shaped sample”) y el campo magnético aplicado es perpendicular al plano de la muestra.

período de las modulaciones magnéticas ($t > \lambda_H$). Dos mecanismos han sido propuestos para explicar esta estabilidad de las redes de skyrmiones (mientras es suprimida en muestras tridimensionales). Uno de ellos se basa en el efecto introducido por una anisotropía uniaxial inducida en la muestra [21, 128]. En láminas de helimagnetos cúbicos, crecidas epitaxialmente, una anisotropía uniaxial puede ser inducida como producto de una discrepancia entre las estructuras de las redes del cristal y el sustrato (por ejemplo Si(111)) en el cual fue crecida [128, 133, 134]. Esta anisotropía uniaxial suprime la fase cónica y estabiliza una serie de estados modulados entre los que se encuentran las redes de skyrmiones [128, 129, 131]. El segundo mecanismo es provisto por *modulaciones quirales* que surgen próximas a las superficies de la muestra [135–138]. Estudios teóricos revelan que estas modulaciones quirales desempeñan un rol decisivo en la estabilización de redes de skyrmiones [139]. En la Fig. 3.19 se muestra la estructura del diagrama de fases (teórico) al variar el espesor de la muestra considerando el efecto de las modulaciones quirales en la estabilidad de redes de skyrmiones.

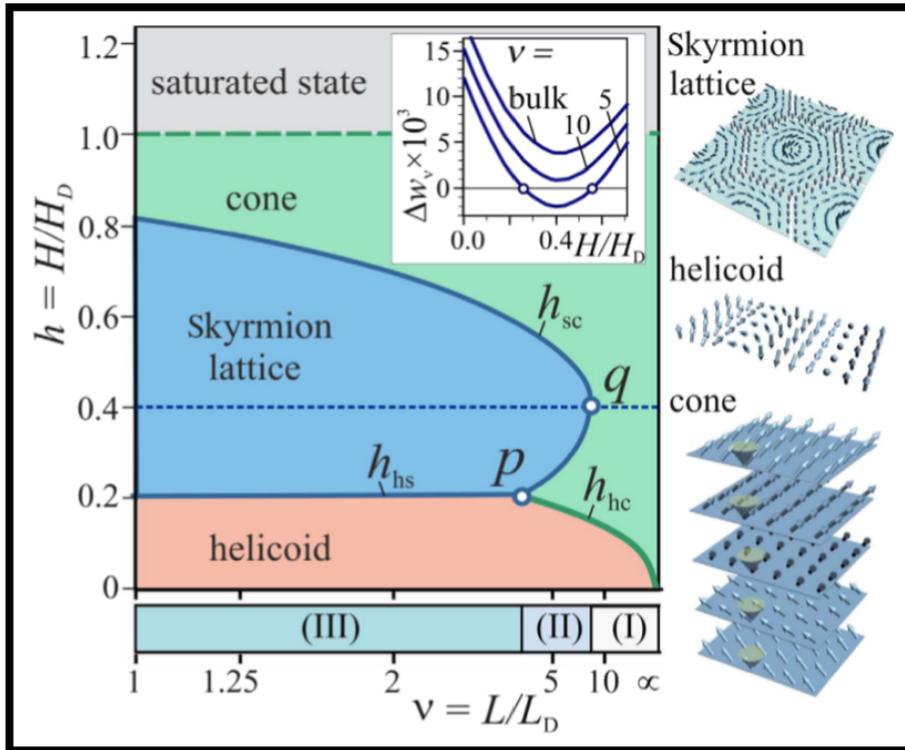


Figura 3.19: Dependencia del diagrama de fases (a $T = 0$) con el espesor de una lámina obtenido teóricamente (figura extraída de Ref. [139]). Los estados magnéticos corresponden al mínimo global de la energía. La densidad de energía para el modelo considerado es $\mathcal{H} = A(\nabla\mathbf{m})^2 + D\mathbf{m} \cdot (\nabla \times \mathbf{m}) - \mu_0 M \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}$, con $\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{z}}$. El campo magnético y el espesor están expresados en variables reducidas $\nu = L/L_D$ y $h = H/H_D$, con $L_D = 4\pi A/|D|$ y $H_D = D^2/(2AM\mu_0)$.

3.6. Síntesis del capítulo

En este capítulo estudiamos skyrmiones en sistemas ferromagnéticos. Vimos, a través del estudio de una serie de sistemas magnéticos, que en general la existencia de skyrmiones se ve favorecida por la presencia de una interacción DM junto con la acción de un campo magnético externo.

Si bien en los modelos que estudiamos aquí no abarcan el amplio espectro de sistemas magnéticos en los que se encuentran skyrmiones; a lo largo de este capítulo hemos estudiado el efecto que diferentes perturbaciones (tanto externas como de origen microscópico) tienen en los skyrmiones. A tales efectos introdujimos un método que proporciona un enfoque para el estudio sistemático de la estabilidad y la manipulación de los skyrmiones. Una característica importante del método reside en su rápida convergencia. En la mayoría de los casos, una expansión en un pequeño número de modos es suficiente para capturar la física del problema, lo que permite un enfoque analítico. En casos más complejos, que requieren un gran número de modos, todavía es posible un tratamiento numérico del problema. El método reproduce satisfactoriamente los resultados numéricos y experimentales disponibles que resumimos a continuación.

- 1) Para el modelo isotrópico, encontramos skyrmiones circulares, su región de estabilidad en el diagrama de fases y el campo crítico para la transición $\text{SkX} \rightarrow \text{H}$, que corresponde a la aparición de deformaciones elípticas de los skyrmiones.
- 2) Para el modelo anisotrópico encontramos la región de estabilidad donde se estabilizan los skyrmiones elípticos. En vista de nuestros hallazgos, vemos que la forma elíptica de los skyrmiones es debido a la presencia de una interacción DM anisotrópica, de hecho, la deformación elíptica es proporcional a la anisotropía: $R_2 \propto D^-$. Hemos mostrado para este modelo que en la región de baja anisotropía la inestabilidad es elíptica, mientras que en el límite de alta anisotropía es triangular.
- 3) Para el modelo isotrópico en un campo magnético inclinado, encontramos que la estructura general del diagrama de fases no se ve afectada (con respecto al caso de campo magnético transversal), sin embargo se observa un aumento del campo crítico a medida que el ángulo de inclinación crece. La consecuencia más importante es una ligera reducción de la región de estabilidad del skyrmión. La forma de los skyrmiones cambia, perdiendo su simetría axial. Este hecho es consistente con los resultados tanto experimentales como numéricos.
- 4) Finalmente, hemos estudiado el efecto de un campo eléctrico externo en la estabilidad de un skyrmión. Cuando se aplica un campo eléctrico transversal, el skyrmión puede volverse inestable por una inestabilidad cardíaca, lo que lleva a un mecanismo para la destrucción de skyrmiones. Por otro lado, un campo eléctrico en el plano podría servir como un elemento para controlar la forma del núcleo de un skyrmión. A nuestro entender, no hay resultados experimentales para un campo eléctrico longitudinal, pero para completar nuestro análisis hemos presentado nuestras predicciones para ese caso. Esperamos que esto motive experimentos relacionados con esta situación.

En los modelos considerados en esta sección los skyrmiones aislados pueden ser encontrados como estados metaestables (a $T = 0$) mientras que el estado de equilibrio termodinámico corresponde a una red hexagonal de skyrmiones, como hemos demostrado al estudiar una red ferromagnética triangular de espines. Esta red de skyrmiones se encuentra en una región intermedia de campos magnéticos $B_{c1} < B < B_{c2}$ donde B_{c1} y B_{c2} son los campos críticos para las transiciones $\text{H} \rightarrow \text{SkX}$ y $\text{SkX} \rightarrow \text{FM}$, respectivamente.

A baja temperatura (distinta de cero) el escenario descrito anteriormente se mantiene en términos generales, con la aparición de una fase intermedia en la que se identifican skyrmiones aislados (a la que nos referimos como “gas de skyrmiones”). Los campos críticos tienen una dependencia cuadrática con D como se pudo verificar tanto por el enfoque variacional como por medio de las simulaciones de Monte Carlo.

En cuanto al espesor t de una muestra hemos visto que es una variable muy importante en el análisis de la estabilidad de redes de skyrmiones. De acuerdo al análisis que realizamos identificamos tres posibles situaciones que dependen de la relación entre t y la longitud característica de las modulaciones magnéticas λ_H :

- 1) $t \lesssim \lambda_H$: el sistema se comporta como si fuera 2D y se encuentran redes de skyrmiones en el estado fundamental ($T = 0$) para una región intermedia de campo magnético normal al plano del sistema.

- 2) $t > \lambda_H$: el sistema no puede considerarse como 2D, aún así, pueden encontrarse redes de skyrmiones a $T = 0$ y los elementos responsables de su estabilidad pueden ser la anisotropía uniaxial o modulaciones quirales en la superficie del material.
- 3) $t \gg \lambda_H$: el sistema es 3D (“bulk”) y se pueden encontrar redes de skyrmiones a $T \neq 0$ en una pequeña región del diagrama de fases $T - B$.

Finalmente los modelos estudiados y resultados discutidos en este capítulo brindan un panorama general sobre el potencial tecnológico que poseen los skyrmiones al poder controlar su estabilidad por medio de campos magnéticos, campos eléctricos, anisotropía (uniaxial o una interacción anisotrópica de DM) originada en esfuerzos inducidos sobre el sistema, o el espesor de una muestra.

Capítulo 4

Skyrmiones en sistemas antiferromagnéticos

“La traición se vuelve inútil cuando la verdad se transforma en una de las máscaras de la mentira.”

*Memorias encontradas en una bañera,
Stanisław Lem.*

RESUMEN: En este capítulo estudiaremos la presencia de redes de skyrmiones en sistemas antiferromagnéticos. Comenzaremos con el estudio de la red cuadrada en la que veremos que no es posible estabilizar una fase de red de skyrmiones. Continuaremos con un análisis del rol de la frustración en la estabilidad de redes de skyrmiones. Con este propósito estudiamos el modelo de Heisenberg de espines clásicos en la red triangular incluyendo la interacción de exchange antiferromagnética, la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya y el efecto de un campo magnético externo. Nos centramos en el estudio de una fase magnética cristalina, denominada red de skyrmiones antiferromagnéticos, que se observó en campos intermedios en trabajos recientes. Esta fase compleja puede ser descrita como tres redes de skyrmiones interpenetradas, una para cada subred de la red triangular original. Siguiendo estos resultados numéricos, hacia el final de este capítulo construimos explícitamente la acción efectiva de baja energía que reproduce la fenomenología correcta y puede servir como punto de partida para estudiar otro tipo de fenómenos relacionados como el acoplamiento a los portadores de carga, las vibraciones de la red, el desorden estructural y los fenómenos de transporte.

4.1. Introducción

Los sistemas antiferromagnéticos han sido el foco de una gran cantidad de trabajo, principalmente desde la sugerencia de que podrían estar asociados al origen del mecanismo de apareamiento en superconductores de alta temperatura crítica [140]. Este tipo de

materiales juega un papel muy importante en el área de la espintrónica y uno de los ejemplos más notables es el de la magnetoresistencia gigante descubierta en 1988 [141–143]. Resulta entonces interesante estudiar como afecta la interacción antiferromagnética a la estabilidad y propiedades de los skyrmiones.

En el capítulo anterior estudiamos skyrmiones en sistemas ferromagnéticos. En general hemos visto que un modelo σ no lineal junto con una descripción del continuo de la interacción DM en un campo magnético, propuesta como el Hamiltoniano de baja energía de estos magnetos quirales, reproduce la fenomenología observada [115]. La presencia de skyrmiones también ha sido estudiada en sistemas antiferromagnéticos. En este sentido Bogdanov y Yablonskii [144] han demostrado la estabilidad de una red de skyrmiones en un gran grupo de sistemas antiferromagnéticos bipartitos ¹ con anisotropía uniaxial (easy-axis). En un trabajo reciente se encontró una nueva fase de skyrmiones en una red triangular antiferromagnética en presencia de una interacción DM y para una determinada región de campo magnético externo [145]. Esta fase exótica, llamada AF-SkX, consiste en una disposición periódica que, observada por subred, se asemeja a una fase de skyrmiones ferromagnéticos (FM-SkX). El campo de espines completo corresponde a tres redes de skyrmiones (idénticas a las observadas en sistemas ferromagnéticos) entrelazadas (como se ve en la Fig. 4.5 (d) y Fig. 4.10). Dicha fase surge en un modelo antiferromagnético simple frustrado que presenta características nuevas notables, por lo que una pregunta que surge naturalmente es si esta nueva textura magnética podría promover algún tipo de mecanismo de apareamiento entre los electrones que se mueven sobre tal perfil magnético [146]. Como primer paso en esta dirección, identificamos y estudiamos en detalle una simple descripción efectiva de baja energía que reproduce la fenomenología de espín correcta y podría servir como un primer paso para analizar el acoplamiento entre los espines localizados y el espín de los electrones de conducción, y que podrían, a su vez, dar lugar a interesantes fenómenos de transporte de electrones [147]. Para este propósito, sobre la base de un análisis combinado que utiliza un enfoque variacional y simulaciones de Monte Carlo a gran escala, obtuvimos predicciones cuantitativas para la existencia, la ubicación y los tamaños de la fase AF-SkX inducida por un campo magnético externo.

El resto de este capítulo está organizado de la siguiente manera. Comenzaremos estudiando un sistema antiferromagnético con interacción DM sobre la red cuadrada. Esta sección es seguida por otras dos dedicadas al estudio de la red triangular en la que consideramos una interacción de intercambio antiferromagnética y una interacción DM. En la primera de ellas presentamos el Hamiltoniano microscópico y hacemos una revisión de los resultados obtenidos por simulaciones numéricas de Monte Carlo. A continuación de esta, construimos la descripción del continuo (de baja energía). A partir de esta teoría efectiva, proponemos un conjunto de Ansätze para las diferentes fases con el objetivo de contrastar los resultados con los obtenidos de las simulaciones numéricas [145]. Finalmente presentamos el diagrama de fases del modelo continuo obtenido con estos Ansätze variacionales. Encontramos un rico comportamiento a baja temperatura del sistema a medida que varía el campo magnético, recuperando todas las fases observadas anteriormente por simulaciones de Monte Carlo. El sistema pasa de una fase helicoidal (HL) en campos bajos a una fase de red de skyrmiones antiferromagnética (AF-SkX) para valores más grandes del campo, y luego, antes de la fase saturada ferromagnética (FM), parece haber una fase

¹Ver nota 2 en la Sec. 2.1.5.

intermedia, que llamamos fase uniforme por subred (SU), que describiremos más adelante. Todas las predicciones analíticas están respaldadas por simulaciones de Monte Carlo del Hamiltoniano microscópico [148]. Concluimos con un resumen y una discusión de nuestros resultados.

4.2. (Ausencia de) skyrmiones en la red cuadrada antiferromagnética

En esta sección consideraremos la versión isotrópica y antiferromagnética del modelo en Ec. 3.18 para una red cuadrada de espines

$$H = \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \{ J \mathbf{m}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{r}+\delta_{\alpha}} + D \delta_{\alpha} \cdot (\mathbf{m}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{m}_{\mathbf{r}+\delta_{\alpha}}) \} - \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{B} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{r}}, \quad (4.1)$$

donde $J > 0$, $\alpha = x, y$, δ_{α} es el vector unitario a lo largo de la dirección α ($\delta_x = \hat{\mathbf{x}}$, $\delta_y = \hat{\mathbf{y}}$) y $\mathbf{m}_{\mathbf{r}}$ es el momento magnético en el sitio \mathbf{r} .

Para construir la teoría efectiva del Hamiltoniano anterior descomponemos el vector unitario $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ en el sitio \mathbf{r} , en términos de una componente alternante ($\mathbf{n}(\mathbf{r})$) y uniforme ($\mathbf{l}(\mathbf{r})$) de modo que $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mu(\mathbf{r}) [e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{n}(\mathbf{r}) + a\mathbf{l}(\mathbf{r})]$, donde a es el parámetro de red del sistema y $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ [149–152]. Los campos \mathbf{n} y \mathbf{l} varían suavemente y satisfacen las condiciones $|\mathbf{n}| = 1$ y $\mathbf{n} \cdot \mathbf{l} = 0$. El factor μ es introducido para conservar la unimodularidad de \mathbf{m} , por lo que $\mu(\mathbf{r}) = (\sqrt{1 + a^2 l(\mathbf{r})^2})^{-1}$. Por medio de esta descomposición y realizando una expansión hasta segundo orden en a , el término de intercambio del Hamiltoniano en la Ec. 4.1 toma la siguiente forma:

$$\mathcal{H}_E = \frac{Ja^2}{2} [(\partial_x \mathbf{n})^2 + (\partial_y \mathbf{n})^2 + 8\mathbf{l}^2]. \quad (4.2)$$

Con esta descomposición resulta que el campo magnético se acopla solo a la componente uniforme del campo de magnetización, con lo que el término de Zeeman adopta la forma [150]

$$\mathcal{H}_Z = -a\mathbf{B} \cdot \mathbf{l}. \quad (4.3)$$

Finalmente para el término de la interacción DM se obtiene [153, 154]

$$\mathcal{H}_{DM} = -aD [\hat{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{n} \times \partial_x \mathbf{n}) + \hat{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n})] = aD \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}). \quad (4.4)$$

En la deducción de las ecuaciones de campo para \mathbf{l} debemos tener en cuenta la condición de ortogonalidad $\mathbf{l} \perp \mathbf{n}$ por medio de la adición del término $\lambda \mathbf{l} \cdot \mathbf{n}$ (λ es un multiplicador de Lagrange) en el Hamiltoniano del sistema. Con esto, la ecuación para \mathbf{l} resulta:

$$\frac{\delta [\mathcal{H}_E + \mathcal{H}_Z + \mathcal{H}_{DM} + \lambda \mathbf{l} \cdot \mathbf{n}]}{\delta \mathbf{l}} = 0, \quad (4.5)$$

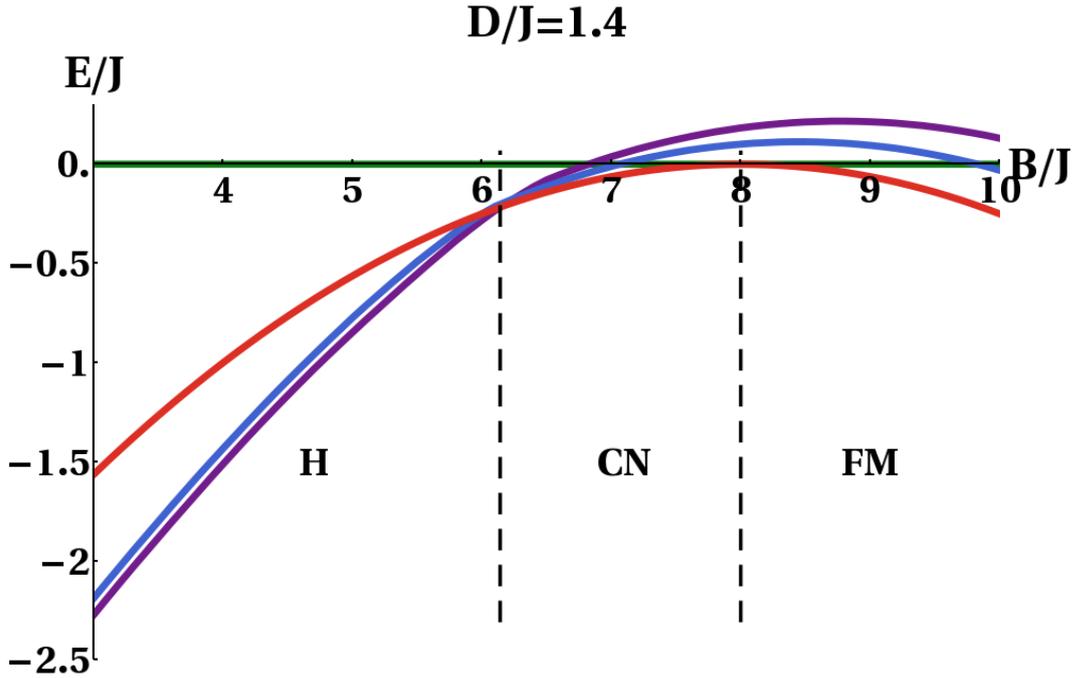


Figura 4.1: Energía de cada una de las fases en función del campo magnético (B/J) para $D/J = 1.4$: fase ferromagnética (FM, curva verde), fase helicoidal (H, curva violeta), red de skyrmiones (SkX, curva azul) y Néel canteado (CN, curva roja). Si bien las energías de estas últimas tres fueron graficadas incluso para $B/J > 8$, solo son relevantes en la región $0 \leq B/J \leq 8$ de modo que para $B/J > 8$ el estado de equilibrio es el ferromagnético.

de donde se obtiene la ecuación

$$8Ja^2\mathbf{l} - a\mathbf{B} + \lambda\mathbf{n} = 0. \quad (4.6)$$

Usando la condición de unimodularidad $|\mathbf{n}| = 1$ obtenemos que el multiplicador λ es $\lambda = a\mathbf{B} \cdot \mathbf{n}$. Finalmente, introduciendo este resultado para λ podemos integrar \mathbf{l}

$$\mathbf{l} = \frac{1}{8Ja} (\mathbf{B} - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}), \quad (4.7)$$

a partir del cual obtenemos un Hamiltoniano efectivo para el campo \mathbf{n} :

$$\mathcal{H} = \frac{Ja^2}{2} [(\partial_x \mathbf{n})^2 + (\partial_y \mathbf{n})^2] + aD\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) - \frac{1}{16J} [\mathbf{B}^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{n})^2]. \quad (4.8)$$

Es importante destacar que este Hamiltoniano efectivo es similar al obtenido para la red ferromagnética (ver por ejemplo Ec. 3.22), la diferencia más significativa se encuentra en la forma en la que el campo magnético se acopla con el campo relevante en cada una de las teorías.

A partir de esta teoría estudiaremos el diagrama de fases por medio de un enfoque variacional en el que nuevamente consideramos los tres estados estudiados en el caso del sistema ferromagnético: helicoidal (H), red de skyrmiones (SkX) y ferromagnético (FM). Los ansatz para el campo \mathbf{n} correspondiente a cada una de estas fases son análogos a los

discutidos en el sistema ferromagnético (Sec. 3.3). A esta lista de estados posibles agregaremos el estado Néel cantedo (CN) en el que tanto \mathbf{n} como \mathbf{l} son campos constantes. Algo importante de este estado es que el término DM es idénticamente nulo. Esto puede inferirse a partir del Hamiltoniano efectivo Ec. 4.8, ya que el término DM contiene solo derivadas de \mathbf{n} que se anula para un estado en el que $\mathbf{n} = cte$. Desde el punto de vista microscópico un estado CN implica que el campo de magnetizaciones puede separarse en dos subredes (que llamaremos “A” y “B”) en cada una de las cuales el campo de magnetización es constante ². En este caso la interacción DM entre un momento magnético de la subred “A” (en el sitio \mathbf{r}) con los cuatro primeros vecinos de la subred “B” resulta:

$$\begin{aligned} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \mathbf{D}_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} (\mathbf{m}_{\mathbf{r}}^A \times \mathbf{m}_{\mathbf{r}'}^B) &= \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \mathbf{D}_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} (\mathbf{m}^A \times \mathbf{m}^B) = \\ &= D\mathbf{m}^A \cdot [\mathbf{m}^B \times \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{m}^B \times \hat{\mathbf{y}} - \mathbf{m}^B \times \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}^B \times \hat{\mathbf{y}}] = 0. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Por lo tanto la energía del estado de Néel es independiente del valor de D . A partir del Hamiltoniano en Ec. 4.8 encontramos que la energía del sistema (para este estado) es mínima para cualquier \mathbf{n} que satisfaga $\mathbf{n} \perp \mathbf{B}$ (es decir la componente alternada del campo de espines debe ser perpendicular al campo magnético aplicado y su orientación es indeterminada). Introduciendo esto en la Ec. 4.7 obtenemos $\mathbf{l} = \frac{\mathbf{B}}{8Ja}$. Ahora, dado que $a|\mathbf{l}| < 1$, esta ecuación solo puede ser resuelta si $|\mathbf{B}| < 8J$ ³, y la energía de este estado es $E_{CN} = -B^2/(16J)$ para $B < 8J$. La energía de la fase FM para este sistema es $E_{FM} = 4J - B$ y tomaremos a la energía de esta fase como referencia para la comparación de las energías de las restantes fases, tal como hicimos en el caso ferromagnético. Hasta aquí la orientación del campo magnético se mantuvo arbitraria, pero en lo que resta de esta sección el campo se considera aplicado a lo largo de la dirección $\hat{\mathbf{z}}$ (perpendicular al plano del sistema).

En la Fig. 4.1 se muestra la energía como función de B/J (para $D/J = 1,4$) de cada una de las fases consideradas en este análisis variacional. Pueden reconocerse dos transiciones de fases, la primera (a bajo campo magnético) corresponde a la transición H→CN, a la que asociamos un campo crítico B_{c1}/J (su valor es $B_{c1}/J \approx 6,14$), y la segunda corresponde a la transición CN→FM (cuyo valor es $B_{c2}/J = 8$).

Puede observarse que para cualquier valor de $0 \leq B/J \leq B_{c1}/J$ la energía del estado SkX se encuentra siempre por encima de la energía del estado H. Esto sucede así para cualquier valor de D/J ⁴, por lo que concluimos que una red de skyrmiones no es estable a $T = 0$ en este sistema. Con todo esto, en el diagrama de fases para este sistema solo se pueden encontrar las fases H, CN y FM como se muestra en la Fig. 4.2. La recta que separa las fases H y CN está dada por la ecuación $B_{c1}/J = 4,38D/J$ mientras que la que separa las fases CN y FM tiene por ecuación $B_{c2}/J = 8$ (esto se debe a que tanto la energía de la fase CN como la de la fase FM son independientes del valor de D).

Como se puede observar en la Fig. 4.2, no existen las redes de skyrmiones como una fase

²Este análisis se retomará cuando estudiemos este problema en la red triangular antiferromagnética (Sec. 4.3).

³En general la Ec. 4.7, con la condición $a|\mathbf{l}| < 1$, solo puede ser resuelta si $|\mathbf{B}| < 8J$, incluso si el estado en consideración no es uniforme.

⁴La energía del estado SkX es siempre mayor que la del estado H y la diferencia entre ellas, $E_H - E_{SkX}$, crece al aumentar D/J .

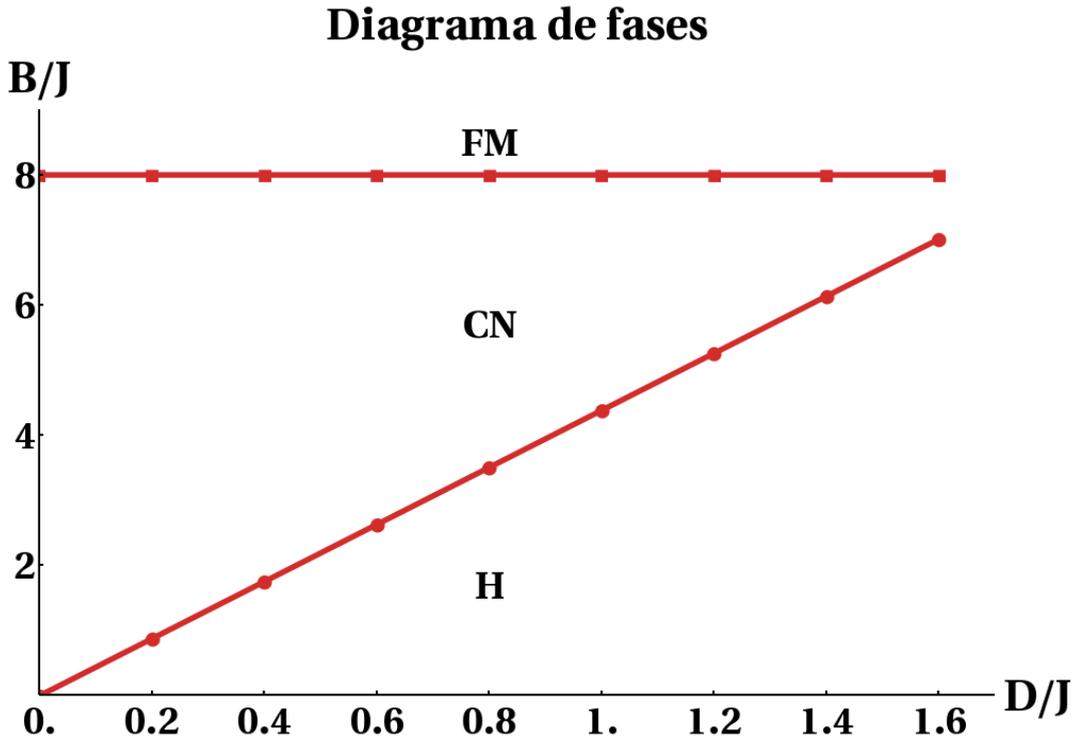


Figura 4.2: En esta figura se representa el diagrama de fases en el espacio B/J y D/J a $T = 0$ obtenido por medio del análisis variacional discutido. Las líneas rojas delimitan las regiones en las que se encuentran las fases hélice (H), el estado de Néel cantedo (CN) y el estado ferromagnético (FM). Los puntos corresponden a los valores de los campos críticos para distintos valores de D/J . La recta que separa las fases H y CN está dada por la ecuación $B/J = 4,38D/J$.

estable a temperatura $T = 0$ en este sistema. Respecto al efecto de considerar interacciones adicionales en el Hamiltoniano de Ec. 4.1 debemos mencionar que el resultado anterior no se ve afectado al incluir una anisotropía uniaxial (mediante la adición de un término de la forma $K \sum_{\mathbf{r}} (\hat{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{r}})^2$, con K constante de anisotropía) como se estudió en los trabajos Refs. [153, 154]. En dichos trabajos los autores identificaron un conjunto de fases uniformes, como una fase antiferromagnética (en la que el campo de magnetización es un campo alternante y paralela al eje $\hat{\mathbf{z}}$) o el estado de Néel cantedo (a la que los autores se refieren como “flip-flop”), y una fase modulada que corresponde a un estado helicoidal caracterizado por una única componente armónica⁵. Sin embargo es importante mencionar que si bien no existen redes de skyrmiones (estado *triple-q*, que consta de tres componentes armónicas) recientemente fueron encontrados, mediante simulaciones de Monte Carlo a baja temperatura, estados modulados a los que se refieren como *doble-q* [154]. Este estado, que se ubica en una región muy estrecha del diagrama de fases (ver Fig. 4.3), persiste incluso en ausencia de anisotropía ($K = 0$) en la región $0,76 \lesssim D/J \lesssim 0,84$ y no corresponde a una red de skyrmiones ya que es topológicamente trivial. Finalmente

⁵En las Refs. [153, 154] los autores encuentran analíticamente el campo crítico para la transición H→CN y en el límite de anisotropía nula este campo tiene la ecuación $B/J = 2\sqrt{2(1 + \sqrt{2})} \approx 4,3947D/J$ en gran acuerdo con nuestro resultado para B_{c1} .

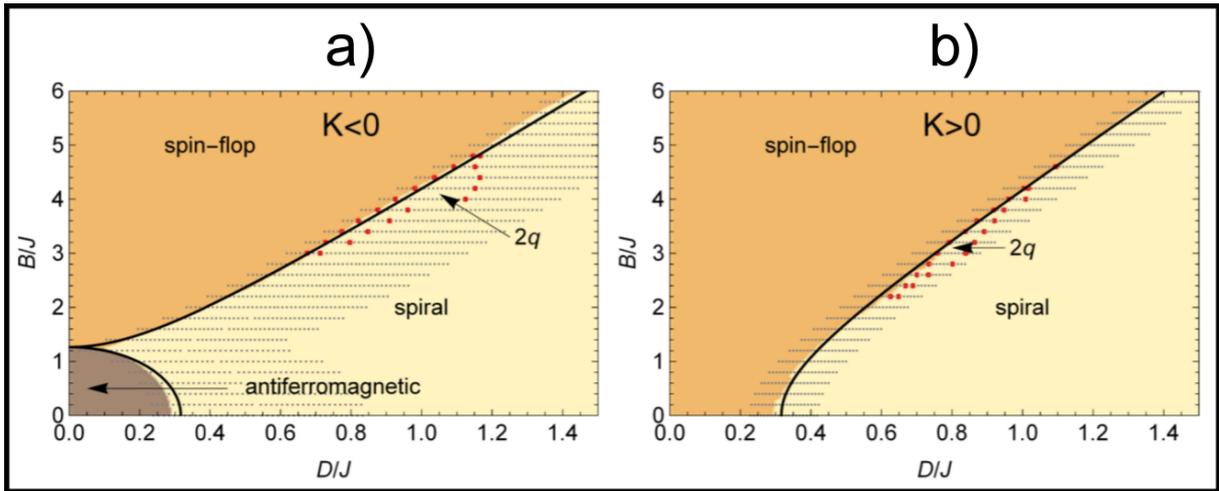


Figura 4.3: Diagrama de fases $B-D$ para materiales antiferromagnéticos con (a) anisotropía “easy-axis” $K/J = -0,1$ y (b) anisotropía “easy-plane” $K/J = 0,1$ a temperatura cero. Los puntos grises muestran valores de parámetros en los que se realizaron simulaciones de Monte Carlo. A partir de estas simulaciones se determinaron las fases que se muestran con colores diferentes (marrón, naranja y amarillo). Los puntos rojos muestran el límite de la fase *doble q*. Las soluciones analíticas para las transiciones de fase se muestran como líneas negras continuas (figura extraída de Ref. [154])

mencionaremos que pueden existir skyrmiones aislados como estados metaestables en sistemas finitos [153, 154].

4.3. Skyrmiones en la red triangular antiferromagnética: el rol de la frustración

Como hemos visto en la sección anterior, la red cuadrada antiferromagnética con interacción DM no presenta una fase de red de skyrmiones. Un elemento fundamental en los sistemas magnéticos es la frustración. Este factor es responsable de nuevos e interesantes fenómenos físicos, entre los cuales podemos mencionar, estados fundamentales altamente degenerados, ordenamientos no colineales y novedosas transiciones de fases [78, 79], y ofrecen un escenario en el cual investigar preguntas fundamentales de la física que van más allá del magnetismo en sí. Esto nos conduce entonces a la siguiente pregunta: ¿qué papel juega la frustración geométrica en la estabilidad de redes de skyrmiones?. Específicamente nos interesa analizar si este factor es necesario (o suficiente) para estabilizar redes de skyrmiones como estado fundamental. Una gran variedad de trabajos tanto teóricos [120, 155–158] como experimentales [159, 160], señalan a este factor como un ingrediente fundamental para la estabilidad de fases con texturas magnéticas no triviales.

El sistema que estudiaremos será una extensión del modelo discutido en la sección anterior a una red triangular antiferromagnética (ver Fig. 4.4). Comenzaremos haciendo una revisión de los resultados más relevantes obtenidos por simulaciones de Monte Carlo. Sobre la base de estos resultados construiremos la teoría efectiva que nos permite ampliar

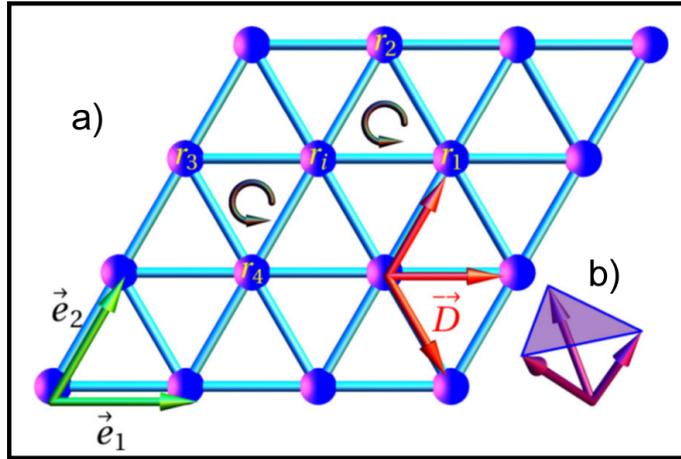


Figura 4.4: (a) Red triangular. Las flechas verdes representan los vectores primitivos de la red $\mathbf{e}_1 = (1, 0)$, $\mathbf{e}_2 = (1/2, \sqrt{3}/2)$, las flechas rojas representan los vectores de Dzyaloshinskii-Moriya. Los sitios etiquetados con \mathbf{r}_i , $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_4$, indican los sitios involucrados en el cálculo de la quiralidad local (Ecs. 4.11 y 4.12). (b) Área de un triángulo subtendido por tres momentos magnéticos empleado en el cálculo del número de skyrmiones $A_{\mathbf{r}}^{ab}$ (Ec. 4.11). Figura extraída de Ref. [145].

el conocimiento que tenemos de este sistema. Hacia el final de esta sección compararemos los resultados provenientes de ambos enfoques.

4.4. Hamiltoniano microscópico y simulaciones de Monte Carlo

Comenzamos con el Hamiltoniano de espines clásico en la red triangular bidimensional (Fig. 4.4 (a)) dada por

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle \mathbf{r}\mathbf{r}' \rangle} [J\mathbf{m}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{r}'} + \mathbf{D}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \cdot (\mathbf{m}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{m}_{\mathbf{r}'})] - \mathbf{B} \cdot \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{m}_{\mathbf{r}}, \quad (4.10)$$

donde $J > 0$ es la constante de intercambio antiferromagnético, $\langle \mathbf{r}', \mathbf{r} \rangle$ indica vecinos más cercanos, los vectores $\mathbf{D}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ describen la interacción DM antisimétrica ($\mathbf{D}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = -\mathbf{D}_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}$) bajo un campo magnético externo $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$, recientemente estudiado en Ref. [145].

Por medio de simulaciones de Monte Carlo se identificó la presencia de tres fases al incrementar el campo magnético: una fase helicoidal (a bajo campo magnético), seguido por una fase de red de skyrmiones (para campos intermedios) a la que llamamos AF-SkX y finalmente una fase que tiene estructura de red de vórtices (en la región de alto campo magnético). Cada una de estas fases puede ser fácilmente identificada al observar la textura de espín en el espacio real como se muestra en la Fig. 4.5.

Para determinar el diagrama de fases, y las propiedades de cada una de sus fases, se estudiaron un conjunto de cantidades termodinámicas como la magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico, pero es de particular interés el cálculo del número de

skyrmiones discretizado χ_Q y la quiralidad escalar total χ_L [161] definidas como:

$$\chi_Q = \frac{1}{4\pi} \left\langle \sum_{\mathbf{r}_i} (A_{\mathbf{r}_i}^{12} \text{sign}[\chi_{L,\mathbf{r}_i}^{(12)}] + A_{\mathbf{r}_i}^{34} \text{sign}[\chi_{L,\mathbf{r}_i}^{(34)}]) \right\rangle, \quad (4.11)$$

$$\chi_L = \frac{1}{8\pi} \left\langle \sum_{\mathbf{r}_i} (\chi_{L,\mathbf{r}_i}^{(12)(34)}) \right\rangle, \quad (4.12)$$

donde $A_{\mathbf{r}_i}^{(ab)} = |(\mathbf{m}_{\mathbf{r}_a} - \mathbf{m}_{\mathbf{r}_i}) \times (\mathbf{m}_{\mathbf{r}_b} - \mathbf{m}_{\mathbf{r}_i})|/2$ es el área local de la superficie subtendida por los tres espines en cada triángulo elemental $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b$ (ver Fig. 4.4 (b)). Aquí $\chi_{L,\mathbf{r}_i}^{(ab)} = \mathbf{m}_{\mathbf{r}_i} \cdot (\mathbf{m}_{\mathbf{r}_a} \times \mathbf{m}_{\mathbf{r}_b})$ es la quiralidad local y $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_1 \sim \mathbf{r}_4$ son los sitios involucrados en el cálculo de χ_Q (ver Fig. 4.4 (a)). Si bien en el límite continuo χ_Q y χ_L coinciden, en un sistema discreto χ_Q resulta ser una mejor aproximación, que χ_L , al área de la esfera (orientada), por lo tanto provee una mejor medida del número de skyrmiones. Con la ayuda de χ_Q (calculado en cada subred, de modo que $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_a$ y \mathbf{r}_b recorren los sitios de una subred) es posible detectar la fase de red de skyrmiones (ver Fig. 4.6 (b), panel central). A bajo campo magnético, $\chi_Q = 0$ a causa de que la configuración de equilibrio corresponde a una helicoides. Incrementando el campo magnético encontramos un valor no nulo de χ_Q que indica la presencia de una fase de red de skyrmiones (AF-SkX). En esta región para un sistema con un número de sitios $N = 48 \times 48$, el número de skyrmiones discretizado en cada subred es $\chi_Q/N_C \sim 12/N_C \approx 1,5 \times 10^{-2}$ (donde N_C es el número de sitios en cada subred, $N_C = N/3$), que está en perfecto acuerdo con el número de skyrmiones que pueden observarse directamente a partir de la configuración de espines (en la Fig. 4.5 (b) se muestra solo una porción del sistema). En la Fig. 4.6 (b), (panel central) también se muestra la curva de χ_L y podemos ver que χ_Q provee una mejor medida del número de skyrmiones. Se puede observar que el número de skyrmiones es aproximadamente constante en toda esta región y decae en una sucesión de pasos como consecuencia de la naturaleza discreta de la red. En esta región se reconoce la presencia de una estructura regular de vórtices.

A través del cálculo del factor de estructura del campo de magnetizaciones ($\mathbf{m}(\mathbf{q})$, en el espacio recíproco) se identificó la presencia de picos de Bragg que caracterizan a cada una de las fases. Las componentes perpendicular y paralela (al eje $\hat{\mathbf{z}}$), $m_{\perp}(\mathbf{q})$ y $m_{\parallel}(\mathbf{q})$ respectivamente, se definen como:

$$m_{\perp}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{\mathbf{r}} m_{\mathbf{r}}^x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right|^2 + \left| \sum_{\mathbf{r}} m_{\mathbf{r}}^y e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right|^2 \right\rangle, \quad (4.13)$$

$$m_{\parallel}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{\mathbf{r}} m_{\mathbf{r}}^z e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right|^2 \right\rangle, \quad (4.14)$$

donde $\langle \dots \rangle$ representa el promedio tomado sobre varias configuraciones de espín y N es el número de sitios en la red. En la Fig. 4.6 (a) se muestran los factores de estructura para las texturas mostradas en la Fig. 4.5. En la fase helicoidal (Fig. 4.5 (a)) la estructura del campo de espines consta de tres helicoides (una para cada una de las subredes A, B y C) interpenetradas. Cada una de estas helicoides está caracterizada por un vector de ordenamiento (el mismo para las tres) como se puede ver en la Fig. 4.6 (a). En la fase

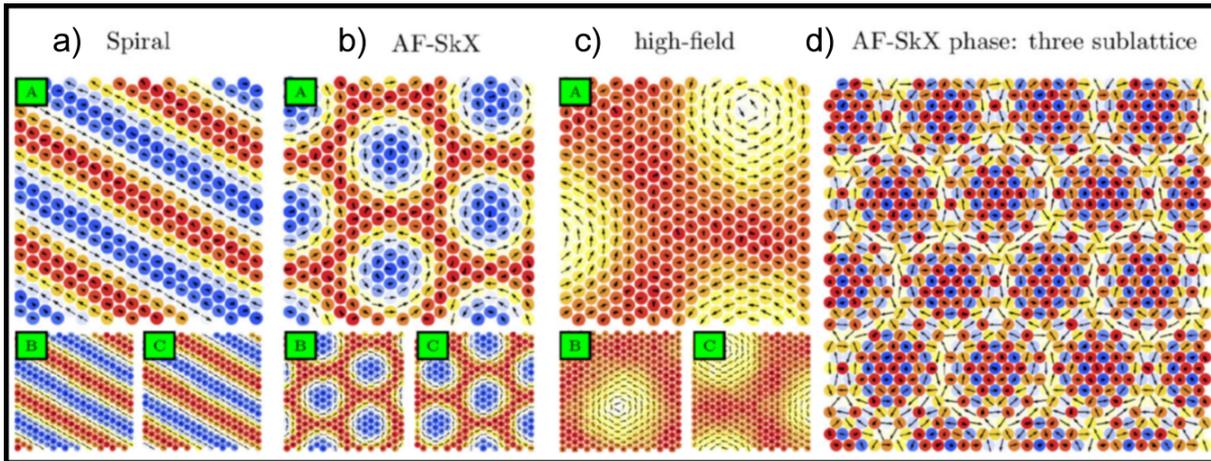


Figura 4.5: Configuración de espines en cada subred para $N = 48 \times 48$, $D/J = 0,5$, $T/J = 9 \times 10^{-3}$, y $B/J=1$ (a), 2.4 (b), y 6.2 (c). Las etiquetas dentro de los recuadros verdes identifican la subred a la que corresponde la figura (A, B o C). En el panel (d) se muestra la configuración completa del campo de magnetizaciones (las tres subredes juntas) para la fase AF-SkX. Figura extraída de Ref. [145].

AF-SkX (ver Fig. 4.5 (b)) se pueden identificar tres redes de skyrmiones (una por cada subred), cada una de estas puede interpretarse como la superposición de tres helicoides con sus correspondientes vectores de ordenamiento como se muestra en la Fig. 4.6 (a). Finalmente en la fase de campo magnético elevado, en la que el campo de magnetizaciones en cada subred revela una estructura de vórtices, se observa un patrón hexagonal de picos (similar a la fase anterior) cercanos al origen de coordenadas en el espacio recíproco (Fig. 4.6 (a)).

En todas las simulaciones el campo de espines revela una estructura de tres subredes que llamaremos A, B y C. Como ejemplo en la Fig. 4.5 se muestran configuraciones de espín para un sistema de 48×48 sitios y $D/J = 0,5$ para tres campos magnéticos representativos de cada fase: (a) $B/J = 1$, (b) $B/J = 2,4$ y (c) $B/J = 6,2$. En particular es importante mencionar que dada una red de skyrmiones en una de las subredes, las otras dos redes de skyrmiones son traslaciones de la anterior a lo largo de los vectores $(1, 0)$ y $(1/2, \sqrt{3}/2)$ en una cantidad $\lambda/\sqrt{3}$, donde λ es la distancia entre los centros de los skyrmiones.

Estos resultados son condensados en el diagrama de fases de la Fig. 4.6 (b) (panel inferior) obtenido para $D/J = 0,5$. La fase AF-SkX es flanqueada por las fases helicoidal y paramagnética, y las líneas que delimitan cada una de estas fases fueron obtenidas analizando los picos del calor específico, los picos en la susceptibilidad magnética (Fig. 4.6 (b), panel superior) y χ_Q (Fig. 4.6 (b), panel central). Un hecho importante sobre la fase AF-SkX es que resulta ser estable incluso a baja temperatura como puede observarse en el diagrama de fases Fig. 4.6 (b) (panel inferior).

Cabe mencionar aquí que estos estudios se han extendido recientemente a la red kagomé [162]. Este trabajo planteó otro escenario en el cual analizar el rol de la frustración magnética en la estabilidad de texturas complejas y si bien en este sistema se encuentra una estructura cristalina similar a una red de vórtices, la textura hallada no corresponde

a una red de skyrmiones.

4.5. Hamiltoniano microscópico y límite del continuo

Con el objetivo de obtener el límite continuo, es conveniente reescribir el Hamiltoniano anterior como una suma de Hamiltonianos en cada plaqueta $\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{r}} H_{\mathbf{r}}$ [148], donde \mathbf{r}

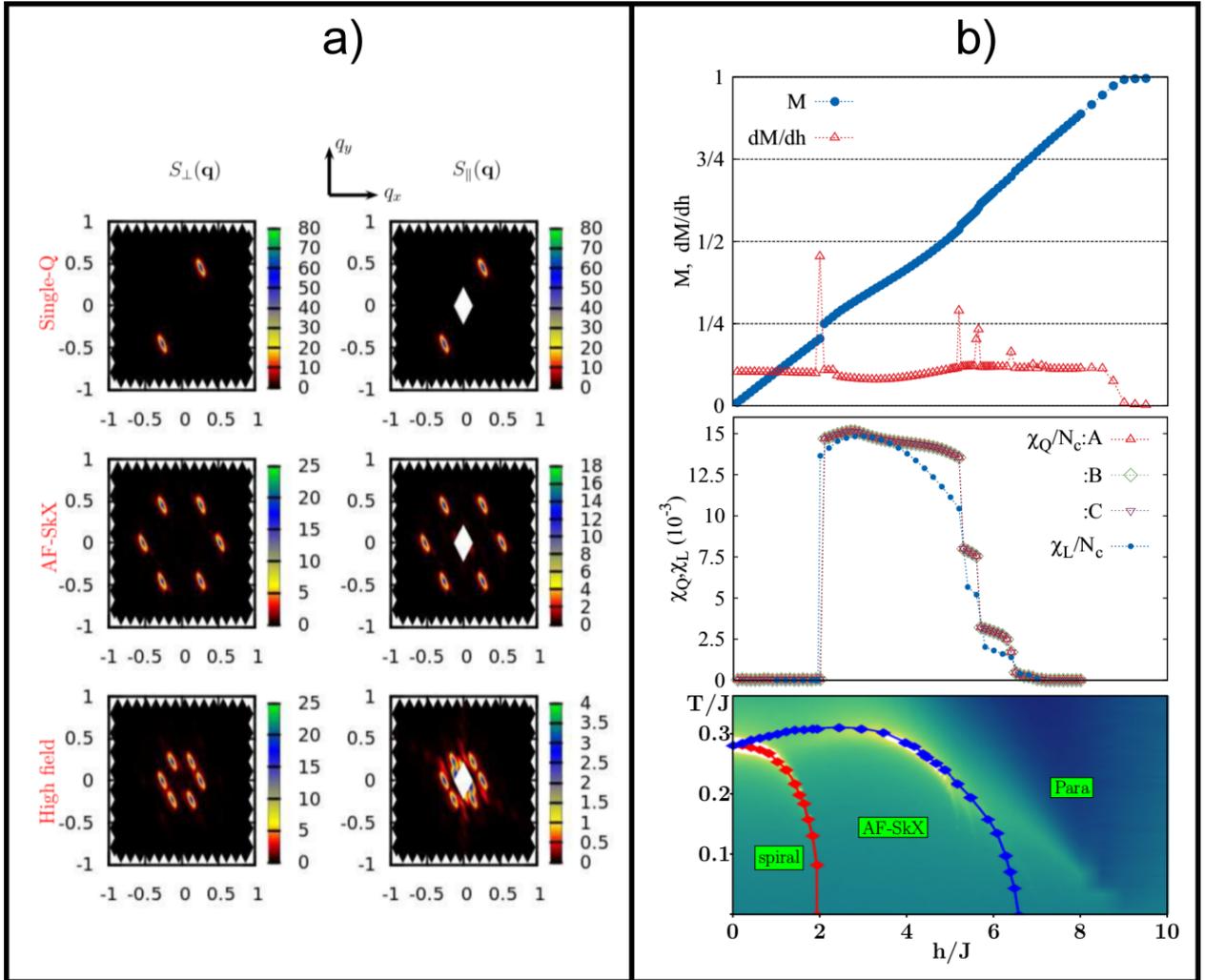


Figura 4.6: (a) Gráfico del patrón de intensidades para el factor de estructura ($N = 96 \times 96$) para la fase helicoidal (fila superior), fase AF-SkX (fila central) y fase de alto campo magnético (fila inferior). (b) Panel superior: Magnetización (en azul) y susceptibilidad magnética (rojo) como función el campo magnético h/J para $N = 48 \times 48$, $D/J = 0,5$, y $T/J = 9 \times 10^{-3}$. Panel central: Número de skyrmiones discretizado χ_Q (triángulos rojos y violetas, y rombos verdes) y quiralidad total χ_L (puntos azules), ambas cantidades calculadas por subred, en función de h/J , para $N = 48 \times 48$ y $D/J = 0,5$. Panel inferior: diagrama de fases $h - T$. Los límites de cada fase fueron obtenidos identificando los picos en el calor específico y los saltos en la quiralidad. Figura extraída de Ref. [145].

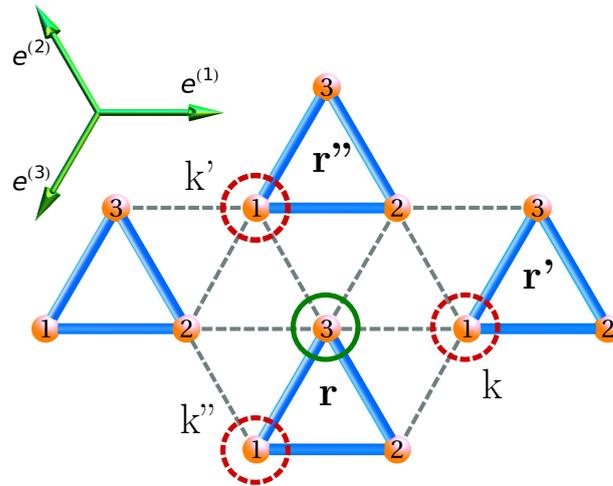


Figura 4.7: Red triangular: \mathbf{r} , \mathbf{r}' , \mathbf{r}'' indican las plaquetas involucradas en un término dado de la densidad Hamiltoniana. A modo de ejemplo, la subred etiquetada como “ 3 ” (dentro del círculo verde), en la plaqueta en \mathbf{r} , tiene tres primeros vecinos “ 1 ” (cada uno dentro de un círculo rojo discontinuo) indicado por las etiquetas k , k' y k'' . En la parte superior izquierda se muestran los vectores directores en la dirección de los acoplamientos.

denota la posición de una plaqueta⁶. Este procedimiento nos permite escribir de forma simétrica la densidad de Hamiltoniano $H_{\mathbf{r}}$ en términos de dos índices i, j que denotan las subredes i y j (que de ahora en adelante se llamará índice de sabor) y un índice k que identifica el vecino de la subred j que estamos considerando [97] (ver Fig. 4.7). Los índices i, j , y k van de 1 a 3. De ahora en adelante, la dependencia en \mathbf{r} de $H_{\mathbf{r}}$ (y los términos incluidos en $H_{\mathbf{r}}$) y en las variables de espín \mathbf{m}_j , se suprime para simplificar la notación, es decir, $H_{\mathbf{r}} \rightarrow H$, $\mathbf{m}_i(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{m}_i$. La densidad Hamiltoniana por plaqueta H está dada por

$$\begin{aligned}
 H &= H_E + H_{DM} + H_z, \\
 H_E &= \frac{J}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_k \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j^{(k)}, \\
 H_{DM} &= \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_k \mathbf{D}_{ij}^{(k)} \cdot (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_j^{(k)}), \\
 H_Z &= - \sum_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{m}_i.
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Suponiendo que cada sabor de espín varía lentamente, una aproximación que vale cerca tanto de los órdenes ferromagnéticos como de los antiferromagnéticos, podemos describir el límite continuo de cada sabor de espín mediante una configuración de campo suave. Bajo tal suposición, podemos expandir el campo de espines \mathbf{m}_j^k en el sitio j alrededor de

⁶Una vez que cada sitio de la red es etiquetado con la subred correspondiente, identificamos a una plaqueta como aquella unidad formada por tres sitios, uno de cada subred, de tal modo que cada sitio de la red está contenido en una (y solo una) plaqueta (ver Fig. 4.7).

la posición del espín \mathbf{m}_i como sigue:

$$\mathbf{m}_j^k = \mathbf{m}_j + a \left[\mathbf{e}_{ij}^{(k)} \cdot \nabla \right] \mathbf{m}_j + \frac{a^2}{2} \left[\mathbf{e}_{ij}^{(k)} \cdot \nabla \right]^2 \mathbf{m}_j + \mathcal{O}(a^3), \quad (4.16)$$

donde a es la distancia entre los vecinos más cercanos y $\mathbf{e}_{ij}^{(k)} = -\text{sgn}[P(ij)]\mathbf{e}^{(k)}$, donde $P(ij)$ es la permutación $(123) \rightarrow (ijl)$, con $\mathbf{e}^{(1)} = (1, 0)$, $\mathbf{e}^{(2)} = (-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$, $\mathbf{e}^{(3)} = (-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$ siendo los directores en la dirección de los bonds (ver Fig. 4.7).

Realizando una expansión en gradientes, la densidad de Hamiltoniano asociada al término de intercambio, hasta segundo orden en a , está dada por:

$$H_E = J \sum_i \sum_{j \neq i} \left(\frac{a^2}{8} \mathbf{m}_i \cdot \nabla^2 \mathbf{m}_j - \frac{1}{2} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \right) + \text{const.} \quad (4.17)$$

El siguiente término en la Ec. 4.15 corresponde a la densidad de Hamiltoniano asociada a la interacción DM. Definimos un vector DM cíclico $\mathbf{D}_{ij}^{(k)} = D\mathbf{e}_{ij}^{(k)}$ como en la Ref. [145]. Usando la expansión en gradientes (Ec. 4.16), H_{DM} , hasta segundo orden en a , se expresa como

$$H_{DM} = \frac{1}{6} \sum_{i,k} \sum_{j \neq i} \left[\mathbf{D}_{ij}^{(k)} \cdot (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_j) + a \mathbf{m}_{ij}^{(k)} \cdot (\mathbf{m}_i \times (\mathbf{e}_{ij}^{(k)} \cdot \nabla) \mathbf{m}_j) + \frac{a^2}{2} \mathbf{D}_{ij}^{(k)} \cdot (\mathbf{m}_i \times (\mathbf{e}_{ij}^{(k)} \cdot \nabla)^2 \mathbf{m}_j) \right]. \quad (4.18)$$

El primer término en el lado derecho de la Ec. 4.18 se anula porque $\sum_k \mathbf{e}_{ij}^{(k)} = 0$. Usando las definiciones de $\mathbf{D}_{ij}^{(k)}$ y de $\mathbf{e}_{ij}^{(k)}$, el segundo término se escribe como:

$$\begin{aligned} & \frac{a}{6} \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_k \mathbf{D}_{ij}^{(k)} \cdot \left[\mathbf{m}_i \times (\mathbf{e}_{ij}^{(k)} \cdot \nabla) \mathbf{m}_j \right] \\ &= -\frac{aD}{4} \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{m}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{m}_j). \end{aligned}$$

Finalmente, el último término en Ec. 4.18 se cancela debido a la antisimetría del acoplamiento de DM ($\mathbf{D}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \equiv -\mathbf{D}_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}$). Por lo tanto, la densidad completa del Hamiltoniano de DM está dada por:

$$H_{DM} = -\frac{aD}{4} \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{m}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{m}_j). \quad (4.19)$$

Finalmente, en el límite continuo, la densidad completa del Hamiltoniano para un antiferromagneto quiral en la red triangular queda

$$H = J \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{2} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + \frac{a^2}{8} \mathbf{m}_i \cdot \nabla^2 \mathbf{m}_j - \frac{aD}{4J} \mathbf{m}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{m}_j) - \frac{1}{3} \sum_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{m}_i. \quad (4.20)$$

Las ecuaciones de campo que se obtiene del Hamiltoniano anterior son no lineales y

difíciles de resolver analíticamente. En cambio, estudiaremos la densidad Hamiltoniana proponiendo diferentes familias de Ansätze. Con el fin de ganar algo de intuición sobre las posibles expresiones para aquellos Ansätze, reescribimos la Ec. 4.20 mediante la introducción de una variable $\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{m}_i$, que representa la magnetización de la plaqueta y depende del campo de espines en cada una de las subredes. Después de algunas manipulaciones algebraicas, la Ec. 4.20 puede ser reescrita de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} H &= H_M + \sum_{i=1}^3 H_i, \\ H_M &= \frac{J}{2}(\mathbf{M}^2 - 3) + a^2 \frac{J}{8} \mathbf{M} \cdot \nabla^2 \mathbf{M} - \frac{aD}{4} \mathbf{M} \cdot (\nabla \times \mathbf{M}), \\ H_i &= -a^2 \frac{J}{8} \mathbf{m}_i \cdot \nabla^2 \mathbf{m}_i + \frac{aD}{4} \mathbf{m}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{m}_i) - \frac{1}{3} \mathbf{B} \cdot \mathbf{m}_i. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Es importante realizar algunas observaciones preliminares. Notamos que la densidad Hamiltoniana ha sido separada en cuatro partes. La primera parte corresponde a una densidad Hamiltoniana H_M para la magnetización de la plaqueta, mientras que el resto corresponde a tres copias de la misma densidad Hamiltoniana H_i , una para cada especie. Cada uno de estos tiene exactamente la forma del modelo σ no lineal de un ferromagneto estudiado por Han et al. [115] para magnetos quirales. Esta es una observación crucial que, junto con el conocimiento de las fases de temperatura finita del sistema [145], motiva los Ansätze que proponemos en la siguiente sección. También debemos notar que el término con derivadas en la densidad de magnetización (H_M), a primera vista, parece conducir a una energía sin límite inferior. Esto es solo un artefacto de la introducción de la variable \mathbf{M} (dependiente de las variables de espín en cada especie). El término Laplaciano en la densidad de magnetización tiene su origen en la interacción de intercambio

$$J \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j = \frac{J}{2} (\mathbf{M}^2 - 3) + a^2 \frac{J}{8} \mathbf{M} \cdot \nabla^2 \mathbf{M} - a^2 \frac{J}{8} \sum_i \mathbf{m}_i \cdot \nabla^2 \mathbf{m}_i, \quad (4.22)$$

y dado que el lado izquierdo de la Ec. 4.22 posee una cota inferior, el término derecho también resultará acotado. Esto significa que una eventual contribución de gran peso que podría surgir del término $a^2 \frac{J}{8} \mathbf{M} \cdot \nabla^2 \mathbf{M}$ será compensada por el término $-a^2 \frac{J}{8} \sum_i \mathbf{m}_i \cdot \nabla^2 \mathbf{m}_i$. Por lo tanto, el Hamiltoniano completo permanecerá acotado, exactamente como el Hamiltoniano original. De hecho, como se describirá explícitamente en la siguiente sección, los términos con derivadas de la magnetización, evaluados en las soluciones propuestas, son órdenes de magnitud más pequeños que el resto de los términos que aparecen en la densidad Hamiltoniana (Ec. 4.21).

4.6. Ansätze y Hamiltoniano efectivo de baja energía

La posibilidad de reescribir el Hamiltoniano continuo como una suma de densidades Hamiltonianas para cada subred o especie H_i más una contribución de magnetización de plaqueta H_M permite un análisis intuitivo de la fenomenología del sistema. Bogdanov et al. [7, 9] y Han et al. [115] han demostrado que los ferromagnetos quirales admiten

redes de skyrmiones (SkX) como estado fundamental. Por lo tanto, la presencia de tres Hamiltonianos H_i (Ec. 4.21) en el límite continuo sugiere fuertemente la posibilidad de un tipo similar de solución no trivial de SkX en cada subred.

Estas tres soluciones SkX equivalentes e independientes deben organizarse de tal manera que su suma, igual a \mathbf{M} , minimice el término correspondiente al Hamiltoniano de la magnetización H_M . Como veremos en el transcurso de las siguientes secciones, este término es el responsable de que la estructura de la fase AF-SkX esté caracterizada por tres redes de skyrmiones interpenetradas.

4.6.1. Ansätze para la red de skyrmiones

Como vimos en la Sec. 3.3, la solución aproximada para la fase de red de skyrmiones, propuesta para el Hamiltoniano de un sabor particular, se puede construir como una superposición de tres hélices con vector de onda \mathbf{k}_μ que satisfacen $\sum_\mu \mathbf{k}_\mu = \mathbf{0}$ ($\mu = 1, 2, 3$). Estos tres vectores se encuentran en el plano de la muestra formando ángulos de $2\pi/3$ entre sí [120]. La solución de red de skyrmiones aproximada se expresa de la siguiente manera:

$$\mathbf{n}_{SkX}(\mathbf{r}) = \frac{1}{n_{SkX}} \left\{ I_{xy} \sum_\mu \sin \left[\frac{2\pi}{T} \mathbf{k}_\mu \cdot \mathbf{r} + \theta_\mu \right] \mathbf{e}_{xy,\mu} + (m_z + I_z \sum_\mu \cos \left[\frac{2\pi}{T} \mathbf{k}_\mu \cdot \mathbf{r} + \theta_\mu \right]) \mathbf{e}_z \right\}, \quad (4.23)$$

donde T es el período de cada hélice; n_{SkX} fija la normalización apropiada $|\mathbf{n}_{SkX}| = 1$, que restringe los valores de las amplitudes I_{xy} (en el plano) y I_z (perpendicular al plano xy) y la contribución homogénea a la magnetización m_z en la dirección $\hat{\mathbf{z}}$. Aquí $\mathbf{e}_{xy,\mu}$ son vectores arbitrarios unitarios en el plano xy que satisface $\sum_\mu \mathbf{e}_{xy,\mu} = \mathbf{0}$, mientras que las fases θ_μ satisfacen $\cos(\theta_1 + \theta_2 + \theta_3) = -1$ [120].

El período T de la hélice puede determinarse como una función de I_{xy} , I_z y m_z por un análisis del escaleo de la energía (postergamos la discusión de este paso, al que le hemos dedicado una sección particular, Sec. 4.8, para analizar en detalle esta propiedad de la energía) y está relacionado con el parámetro de red del cristal de skyrmiones R_{SkX} (la distancia entre los centros de dos skyrmiones vecinos) a través de la ecuación $R_{SkX} = \frac{2T}{\sqrt{3}}$.

Ahora, los Ansätze para la solución completa queda expresado (a partir de la solución propuesta para cada una de las subredes) como:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_1(\mathbf{r}) &= \mathbf{n}_{SkX}(\mathbf{r}), & \mathbf{m}_2(\mathbf{r}) &= \mathbf{n}_{SkX}(\mathbf{r} + \mathbf{T}_1), \\ \mathbf{m}_3(\mathbf{r}) &= \mathbf{n}_{SkX}(\mathbf{r} + \mathbf{T}_2), \end{aligned} \quad (4.24)$$

donde \mathbf{T}_1 , \mathbf{T}_2 son traslaciones arbitrarias en el plano xy . La propuesta de tres redes de skyrmiones desplazadas por medio de las traslaciones \mathbf{T}_1 y \mathbf{T}_2 está motivada por la estructura que hemos observado en la fase AF-SkX y discutido en la Sec. 4.4.

4.6.2. Ansätze de hélices

En la fase helicoidal, la estructura de espín es un caso especial del Ansatz Ec. 4.23 y consta de tres espirales interpenetradas, una para cada subred, como en la Ec. 4.24, pero

con un solo modo \mathbf{k}_{μ_0} ,

$$\mathbf{n}_H(\mathbf{r}) = \frac{1}{n_H} \left\{ I_{xy} \sin \left[\frac{2\pi}{T} \mathbf{k}_{\mu_0} \cdot \mathbf{r} + \theta \right] \mathbf{e}_{xy} + (m_z + I_z \cos \left[\frac{2\pi}{T} \mathbf{k}_{\mu_0} \cdot \mathbf{r} + \theta \right]) \mathbf{e}_z \right\}, \quad (4.25)$$

donde de nuevo la constante n_H fija la normalización $|\mathbf{n}_H| = 1$ y el Ansatz para la solución completa está dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_1(\mathbf{r}) &= \mathbf{n}_H(\mathbf{r}), & \mathbf{m}_2(\mathbf{r}) &= \mathbf{n}_H(\mathbf{r} + \mathbf{T}_1), \\ \mathbf{m}_3(\mathbf{r}) &= \mathbf{n}_H(\mathbf{r} + \mathbf{T}_2), \end{aligned} \quad (4.26)$$

donde $\mathbf{T}_1, \mathbf{T}_2$ son traslaciones en el plano xy distintas (al menos en principio) de las traslaciones correspondientes a la red de skyrmiones.

4.6.3. Ansätze de espín uniforme por subred

El diagrama de fases magnético para el modelo definido por la Ec. 4.10 con $D = 0$ ha sido discutido en las Refs. [163, 164]. A temperatura cero y campo magnético cero, el estado fundamental es una configuración planar con los espines dispuestos en una estructura de 120° descrita por el vector de onda $k = (4\pi/3, 0)$. En un campo magnético, la energía se minimiza cuando la restricción

$$\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3 = \mathbf{B}/(3J), \quad (4.27)$$

se cumple en cada plaqueta. Esta restricción persiste hasta el campo de saturación $B = 9J$, donde los espines están completamente polarizados y alineados en la dirección de campo magnético.

Para $D \neq 0$ la discusión anterior deja de tener validez ya que el término DM estabiliza nuevas configuraciones. Sin embargo, vale la pena señalar que incluso para $D \neq 0$ existen configuraciones de espín en las que la contribución de DM se anula. Este es el caso que se presenta cuando el campo de espines es uniforme en cada subred. Esto se ve claramente en nuestro modelo efectivo, ya que el término DM contiene derivadas de los campos de espín. Si uno recurre al modelo microscópico, puede demostrar que la suma de las interacciones DM de un espín específico con sus primeros seis vecinos es cero para la elección que hemos considerado de los vectores \mathbf{D}^7 . Así, para este tipo de configuraciones, que de ahora en adelante denominaremos SU para “sublattice uniform”, el vínculo dado por la Ec. 4.27 sigue siendo válido, y este es un posible estado de equilibrio que debe considerarse en el siguiente análisis del diagrama de fases. La energía por plaqueta de los estados que satisfacen la condición Ec. 4.27 es dependiente del campo B , independiente de D (al igual que en el caso de la red cuadrada para el estado Néel canted), y está dada por

$$E_{SU} = -\frac{B^2}{18J} - J\frac{3}{2}. \quad (4.28)$$

⁷La demostración de este resultado se realiza siguiendo la misma línea en la que se demostró que en el estado CN, para el sistema antiferromagnético en la red cuadrada, el término de Dzyaloshinskii-Moriya se anula (ver Sec. 4.2, Ec. 4.9). Estos estados CN y SU tienen en común el hecho de ser estados uniformes en cada subred.

Finalmente, en el punto de saturación, la energía por plaqueta del estado ferromagnético (para $B > 9J$) es

$$E_{FM} = 3J - B. \quad (4.29)$$

Ahora que hemos descrito el conjunto de Ansätze en base a los cuales estudiaremos el Hamiltoniano, estamos en posición de comparar los valores de los términos que incluyen derivadas de \mathbf{M} con el resto de los términos incluidos en la densidad Hamiltoniana (Ec. 4.21). Primero, analicemos estos términos en la fase de hélice. En este caso, la magnetización de la plaqueta corresponde a una superposición de tres ondas helicoidales, cada una dada por la Ec. 4.25, separados (espacialmente) por una traslación en la dirección de propagación. En el caso donde la distancia entre los máximos de la componente m_i^z de espín es uniforme (es decir, la diferencia de fase entre cada una de estas componentes es $2\pi/3$ como se verá en la próxima sección), es sencillo ver a partir del Ansatz en la Ec. 4.25 que \mathbf{M} mostrará pequeñas variaciones espaciales: $\mathbf{M}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{M} = \text{const}$. Para la fase SkX, un análisis similar al anterior nos lleva a la misma conclusión. Estas afirmaciones se confirman mediante nuestros cálculos numéricos realizados para ambos Ansätze para diferentes valores del acoplamiento D y como función de \mathbf{B} . Nuestros resultados muestran que la magnetización de la plaqueta permanece aproximadamente constante, y como consecuencia de esto la contribución de los términos de Laplaciano y rotor en H_M son dos órdenes de magnitud más pequeños que el resto de los términos presentes en la densidad Hamiltoniana de la Ec. 4.21 (ver Fig. 4.8). Para este propósito, comparamos las cuatro contribuciones (con derivadas espaciales) de la energía total, a saber, E_{nlsm} , E_{dm} , E_{Mnlsm} y E_{Mdm} , donde

$$E_{nlsm} = -a^2 \frac{J}{8} \sum_{\mathbf{r}} \sum_i \mathbf{m}_i \cdot \nabla^2 \mathbf{m}_i, \quad (4.30)$$

$$E_{dm} = \frac{aD}{4} \sum_{\mathbf{r}} \sum_i \mathbf{m}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{m}_i), \quad (4.31)$$

$$E_{Mnlsm} = \frac{Ja^2}{8} \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{M} \cdot \nabla^2 \mathbf{M}, \quad (4.32)$$

$$E_{Mdm} = -\frac{aD}{4} \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{M} \cdot (\nabla \times \mathbf{M}). \quad (4.33)$$

En la Fig. 4.8, graficamos los cocientes entre los cuatro términos Ecs. 4.30 - 4.33, estableciendo a E_{dm} como escala, para el caso $D/J = 1/2$. Observamos que, en las fases HL y AF-SkX, ambos E_{Mnlsm}/E_{dm} y E_{Mdm}/E_{dm} son despreciables en casi todo el rango de campo magnético, excepto en dos ventanas estrechas alrededor del campo de transición donde el valor de estas relaciones es menor que 5×10^{-2} . En las fases homogéneas SU y FM, todos los términos con derivadas son cero. Este comportamiento se repite en todo el rango que hemos explorado, $D/J < 1$, lo que lleva a la conclusión de que las contribuciones de los términos Laplaciano y rotor en H_M son al menos dos órdenes de magnitud más pequeños que el resto de los términos presentes en el Hamiltoniano.

Las simulaciones de Monte Carlo muestran que la variación espacial de la magnetización es pequeña comparada con la variación del espín en cada subred, lo que confirma la observación realizada por el enfoque variacional. Basándonos en el análisis anterior,

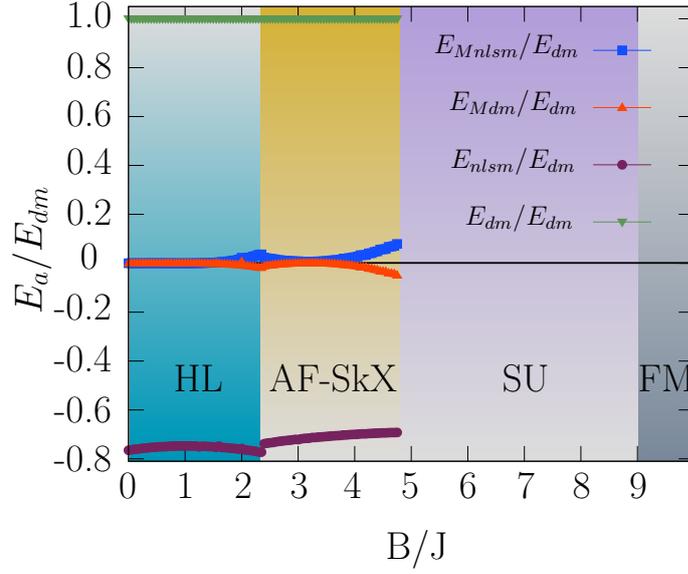


Figura 4.8: Comparación entre diferentes contribuciones del Hamiltoniano (Ec. 4.21) para el caso $D/J = 1/2$. Comparamos los cuatro términos $E_a = \{E_{nlsm}, E_{dm}, E_{Mnlsm}, E_{Mdm}\}$ (ver las Ecs. 4.30 - 4.33) usando E_{dm} como escala. En las fases HL y AF-SkX, los términos dominantes son los que provienen de $\sum_i H_i$ en la Ec. 4.21. Todos estos términos son cero en las fases SU y FM (homogéneas).

terminamos esta sección proponiendo un Hamiltoniano efectivo que rescata la física de baja energía de este antiferromagneto quiral dado por la Ec. 4.10.

4.6.4. Teoría efectiva de baja energía

De la discusión anterior, el Hamiltoniano efectivo está dado por

$$\begin{aligned}
 H^{eff} &= \sum_{i=1}^3 H_i + H_M^{eff}, \quad (4.34) \\
 H_i &= -\frac{Ja^2}{8} \mathbf{m}_i \cdot \nabla^2 \mathbf{m}_i + \frac{aD}{4} \mathbf{m}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{m}_i) - \frac{1}{3} \mathbf{B} \cdot \mathbf{m}_i, \\
 H_M^{eff} &= \frac{J}{2} (\mathbf{M}^2 - 3), .
 \end{aligned}$$

donde H_M^{eff} corresponde a la versión simplificada de H_M en la Ec. 4.21. Mostraremos en la sección siguiente que este Hamiltoniano efectivo capta todos los detalles esenciales del diagrama de fases.

Es notable que este Hamiltoniano pueda ser considerado como la suma de tres acciones efectivas de Ginzburg-Landau (una para cada sabor) más un término que los acopla. A partir del primer término de la suma uno puede esperar, por separado en cada subred, las tres fases bien conocidas, HL, SkX y FM.

4.7. Resultados y diagrama de fases

En esta sección construimos el diagrama de fases completo a partir del Hamiltoniano en la Ec. 4.34, prestando especial atención a la aparición de la fase topológica AF-SkX. En el estudio del diagrama de fases consideramos cuatro fases, a saber, las fases HL y SkX con energías E_{HL} y E_{SkX} , respectivamente, junto con las fases SU y FM presentadas anteriormente. Para encontrar la configuración de mínima energía, fijamos los parámetros variacionales de manera autoconsistente utilizando el método de Nelder-Mead [122] (ver descripción de este método en el Apéndice B), que es uno de los más utilizados para la optimización directa. El procedimiento consiste en introducir una conjetura inicial para I_{xy} y m_z y determinar variacionalmente los valores de \mathbf{T}_1 y \mathbf{T}_2 de manera consistente. De este procedimiento resulta que \mathbf{T}_1 y \mathbf{T}_2 están relacionados con el parámetro T . Encontramos que $\mathbf{T}_2 = -\mathbf{T}_1 = \frac{2}{3}T\hat{\mathbf{x}}$ para la red de skyrmiones⁸, mientras que para la fase helicoidal $\mathbf{T}_2 = -\mathbf{T}_1 = \frac{1}{3}T\hat{\mathbf{x}}$.

La minimización variacional de las energías para las diferentes fases conduce al diagrama de fases que se muestra en el panel superior de la Fig. 4.9, donde se resaltan los límites de las fases obtenidos a partir de los mínimos de la energía como se muestra en el panel inferior de Fig. 4.9. Como ejemplo, en la Fig. 4.10, mostramos una textura representativa obtenida por el Ansatz variacional en la fase AF-SkX ($D/J = 1/2$ y $B/J = 3$). Los círculos de colores en la Fig. 4.10 indican los núcleos de los skyrmiones en cada una de las subredes.

La característica principal de este diagrama es la presencia de las cuatro fases, a saber, HL, AF-SkX, SU y FM, en una amplia región del espacio $D - B$ ($D > 0$). Sin embargo, existe un valor crítico $D_c/J \approx 0,2$ para que la red de skyrmiones sea estable. Debajo de este valor la fase de red de skyrmiones es excluida independientemente de la magnitud del campo externo. El diagrama de fases para campos pequeños está dominado por una fase helicoidal con un vector de onda que se encuentra en el plano. Esta fase comienza en campo magnético $B/J = 0$ y se extiende hasta B_{c3} para $D/J < D_c/J$ y hasta B_{c1} para $D/J > D_c/J$ (ver Fig. 4.9).

El diagrama de fases presenta una amplia región con una textura magnética compleja que se describe como la superposición de tres redes de skyrmiones, una para cada subred. La región del espacio de parámetros donde esta fase es estable está delimitada por las curvas B_{c1} y B_{c2} . Desde B_{c2} y B_{c3} hasta el campo de saturación B_{c4} , la fase SU se estabiliza.

Para las fases HL y AF-SkX, el valor optimizado del período T muestra una pequeña dependencia lineal en el campo externo (el mismo para ambas fases, como las obtenidas por las simulaciones de Monte Carlo [145]). En la Fig. 4.11, vemos que el período medio toma los mismos valores para el estado HL y para el estado AF-SkX que depende de D y J de la forma $T(D/J) \simeq \frac{5,7J}{D}$.

Para $D/J = 1/2$, obtenemos $T \approx 10,8 \pm 0,6$ (este valor debe compararse con la longitud de onda $T \approx 11,4$ de las fases HL y AF-SkX que se encuentra en la Ref. [145] obtenida por simulaciones de Monte Carlo). Podemos definir el radio de un skyrmión (en una subred)

⁸En la Sec. 4.4 se mostró que a partir de la red de skyrmiones en una de las subredes es posible obtener las otras dos por medio de traslaciones en $\lambda/\sqrt{3}$. El parámetro T y λ están relacionados por la ecuación $\lambda = 2T/\sqrt{3}$, con lo cual ambos resultados, concernientes a la relación entre las tres subredes, coinciden.

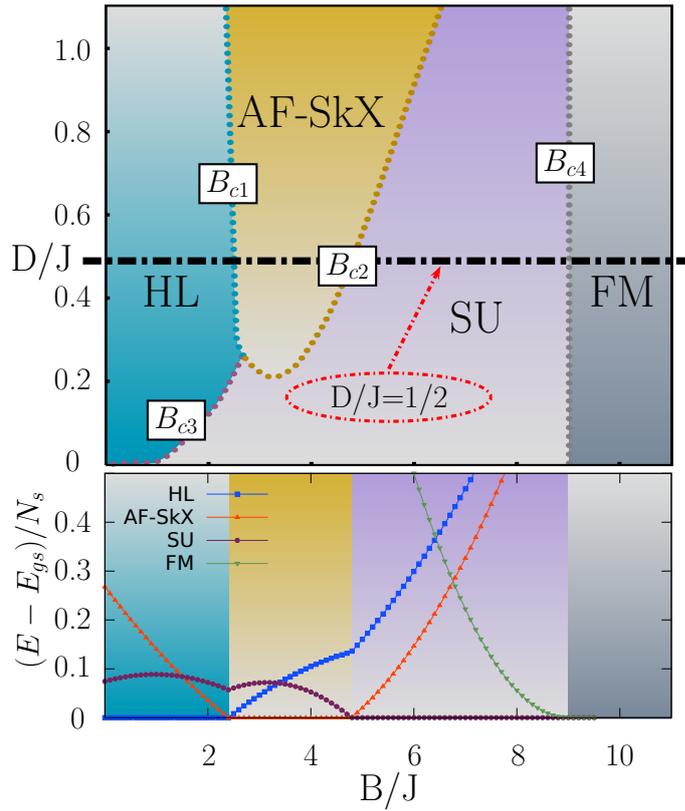


Figura 4.9: Panel superior: Diagrama de fases; las líneas de puntos corresponden a los límites entre las diferentes fases marcadas por los campos B_{c1}, \dots, B_{c4} (funciones de D). Panel inferior: Las energías $(E_{\text{fase}} - E_{\text{gs}})$ de los cuatro estados del antiferromagneto quiral triangular con $D/J = 1/2$ como una función del campo magnético externo B . Este ejemplo corresponde al camino recorrido por la línea negra discontinua en el diagrama de fases del panel superior. En esta figura E_{gs} representa la energía del estado fundamental del sistema.

como el radio de la circunferencia del contorno definido por $m_z = 0$. En la parte interna del panel superior de la Fig. 4.11, mostramos el tamaño del skyrmión como una función del campo magnético. Observamos que el comportamiento del espaciamiento óptimo del skyrmión en función del campo magnético varía muy lentamente en la región de la fase AF-SkX debido a su estabilidad topológica. Este comportamiento se traduce precisamente en un amplio rango de estabilidad de la fase AF-SkX en la que el número de skyrmiones permanece fijo.

Es importante aquí revisar algunos de los hechos básicos relacionados con el comportamiento de las redes de skyrmiones en ferromagnetos quirales y compararlos con los resultados para los sistemas antiferromagnéticos. En el sistema ferromagnético quiral, dos parámetros son relevantes en la caracterización de la estructura del skyrmión. El primero es el núcleo de skyrmión, que tiende a disminuir a medida que el campo magnético crece [21], con el fin de aumentar el fondo polarizado según el campo magnético (FM)⁹. Como

⁹Este resultado fue presentado en la Sec. 3.1.3.1 (Ec. 3.25) al estudiar skyrmiones en la red ferromagnética.

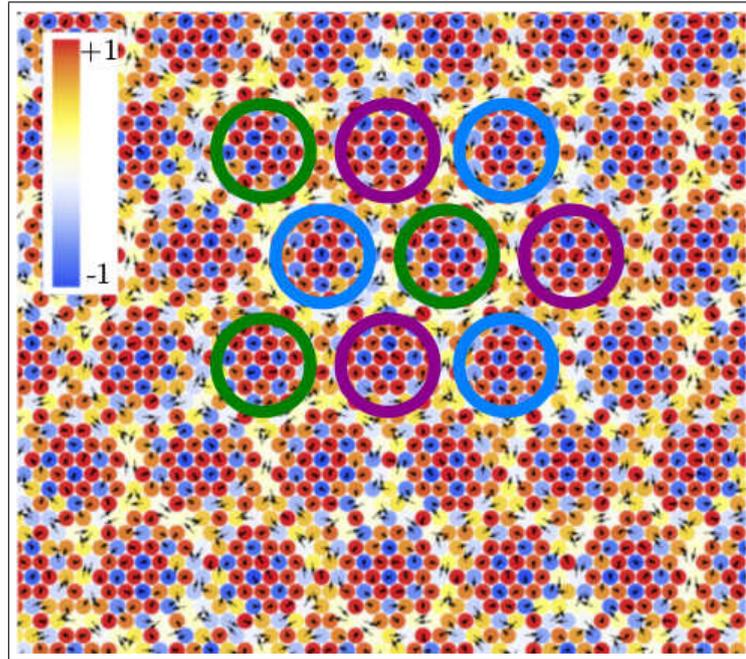


Figura 4.10: Textura magnética representativa de la fase AF-SkX obtenida por la teoría efectiva de baja energía (Ec. 4.34) y el *Ansatz* variacional para $D/J = 1/2$ y $B/J = 3$. Las flechas representan la componentes xy del espín, mientras que los puntos de colores (de azul a rojo) representan su componente z . Los círculos (verde, azul y violeta) indican la posición de los centros de los skyrmiones en cada una de las subredes.

se muestra en el panel superior de la Fig. 4.11, este comportamiento también está presente para los skyrmiones del sistema antiferromagnético. El segundo parámetro es el período de la red de skyrmiones, que tiene en cuenta la distancia entre dos skyrmions adyacentes. En el caso ferromagnético, el sistema pasa del estado SkX al estado de FM, donde se observa una divergencia en el período de la red de skyrmiones [21]. Esta divergencia tiene lugar precisamente en el límite de la región de coexistencia de SkX-FM (donde la energía de la fase FM es igual a la energía de la fase SkX). En contraste, en el sistema antiferromagnético, la transición ocurre de una manera diferente: el sistema pasa del estado AF-SkX al estado SU y a la fase FM a medida que aumenta el campo magnético. Por lo tanto, el sistema experimenta una transición de fase a la fase SU antes de que el período de la red de skyrmiones comience a crecer.

Para capturar el carácter topológico de la configuración de campo para cada sabor de espín, introducimos el índice topológico y definimos la magnetización total (normalizada) en la dirección $\hat{\mathbf{z}}$:

$$Q_{top} = \frac{1}{4\pi} \int_{u.c.} \mathbf{m} \cdot (\partial_x \mathbf{m} \times \partial_y \mathbf{m}) d^2r, \quad (4.35)$$

$$m_z^T = \frac{1}{A_{u.c.}} \int_{u.c.} m_z d^2r, \quad (4.36)$$

donde la integración se realiza en una celda unidad de la textura magnética con área $A_{u.c.}$. En el panel inferior de la Fig. 4.11, mostramos el comportamiento de la magnetización y la

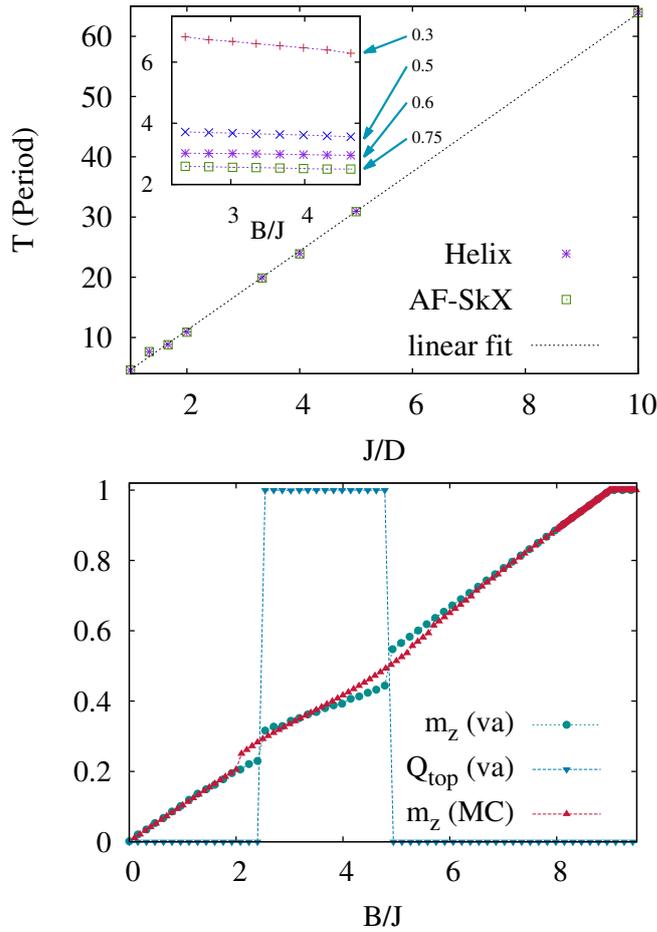


Figura 4.11: Panel superior: Variación del período con J/D para SkX (cuadrados verdes) y HL (estrellas violetas). Recuadro interior: el radio del skyrmión en función del campo magnético externo para varios valores de D . Panel inferior: carga topológico Q_{top} (triángulos celestes) y magnetización m_z^T (círculos celestes) como función del campo magnético para $D = 0,5J$ y magnetización vs. campo magnético B (triángulos rojos) calculada por el *Ansatz* variacional y simulaciones de Monte Carlo, respectivamente.

carga topológica en función del campo magnético. Vemos que la fase helicoidal corresponde a la configuración trivial con $Q_{top} = 0$, mientras que en la fase AF-SkX (estado de triple hélice) $Q_{top} = 1$ porque cada celda unitaria solo contiene un skyrmión. La curva de magnetización revela un crecimiento casi lineal hasta el campo de saturación. Sin embargo, vemos dos discontinuidades al pasar de la fase HL a la fase AF-SkX y de AF-SkX a la fase SU.

4.8. Escaleo de la energía

Las texturas magnéticas consideradas previamente, a saber, HL y AF-SkX, son configuraciones periódicas en las direcciones x e y con períodos αT y βT , respectivamente, con α, β fijadas por la simetría de la textura (para la fase HL $\alpha = \beta = 1$, y para AF-SkX $\alpha = 1$ y $\beta = 2/\sqrt{3}$). Esto nos permite calcular la energía total como la energía de una

celda (de área $A_{u.c.} = \alpha\beta T^2$) multiplicada por el número de celdas, $L^2/(\alpha\beta T^2)$, en una muestra de área L^2 . Además, separamos las diferentes contribuciones en la densidad de energía según el orden de las derivadas espaciales, por ejemplo el término de intercambio es cuadrático en las derivadas y el término DM es lineal. Con todo esto, la energía total se puede escribir como

$$E(T, I_{xy}, I_z, m_z) = \frac{L^2}{\alpha\beta T^2} \sum_{i=0}^2 E_i(T, I_{xy}, I_z, m_z), \quad (4.37)$$

con

$$E_i(T, I_{xy}, I_z, m_z) = \int_0^{\alpha T} dx \int_0^{\beta T} dy \mathcal{E}_i(T, I_{xy}, I_z, m_z), \quad (4.38)$$

donde $\mathcal{E}_i(T, I_{xy}, I_z, m_z)$ denota la densidad de energía que contiene derivadas de orden i -ésimo. Podemos reescribir los diferentes términos usando sus propiedades bajo transformaciones de escala ($\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r}/T$). Podemos separar la dependencia en T de la siguiente manera

$$\begin{aligned} E_i(T, I_{xy}, I_z, m_z) &= \int_0^{\alpha T} dx \int_0^{\beta T} dy \mathcal{E}_i(T, I_{xy}, I_z, m_z) \\ &= T^{2-i} \int_0^{\alpha} dx' \int_0^{\beta} dy' \mathcal{E}_i(1, I_{xy}, I_z, m_z) \\ &= T^{2-i} E_i(1, I_{xy}, I_z, m_z), \end{aligned}$$

y escribir la energía de la muestra como

$$E(T, I_{xy}, I_z, m_z) = \frac{L^2}{\alpha\beta} \left[\frac{E_2}{T^2} + \frac{E_1}{T} + E_0 \right].$$

Esto muestra que toda la dependencia de la variable T puede ser reabsorbida en la expresión de la energía del sistema como factores que corresponden a potencias de T . Por lo tanto la minimización de la energía con respecto a T nos da una expresión para esta magnitud en términos de E_2 y E_1 ¹⁰ (que son evaluados numéricamente),

$$T^* = -\frac{2E_2}{E_1}. \quad (4.39)$$

Este valor de T corresponde efectivamente a un mínimo de la energía. Si evaluamos la segunda derivada de Ec. 4.39 respecto de T en el valor T^* encontramos

$$\frac{d^2 E(T, I_{xy}, I_z, m_z)}{dT^2} = \frac{1E_1^4}{8E_2^3} > 0.$$

¹⁰El término DM tiene una contribución de signo negativo a la energía ($E_1 < 0$) mientras que el término de intercambio es siempre positivo ($E_2 > 0$) por ser cuadrático en las derivadas.

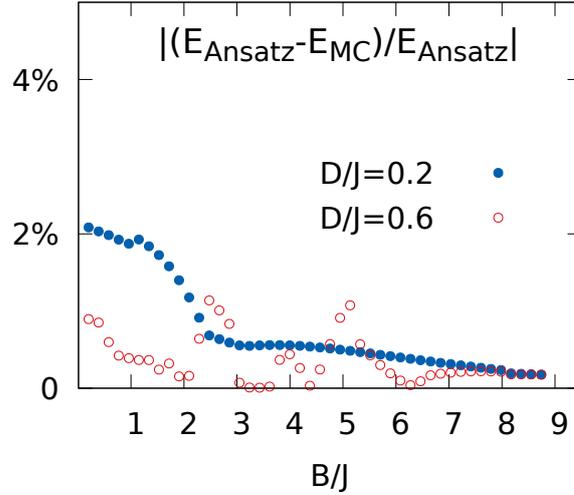


Figura 4.12: Comparación de las energías como función del campo magnético (B) obtenidas mediante cálculos variacionales en base a los Ansätze propuestos y simulaciones de Monte Carlo para $D/J = 0,2$ y $0,6$. Los valores específicos de D/J se eligieron como representativos de dos posibles caminos en el diagrama de fases al variar el campo externo B : uno que va directamente de la fase HL a la fase SU (caso $D/J = 0,2$) y otro en el que el camino atraviesa la fase AF-SkX ($D/J = 0,6$).

4.9. Comparación con simulaciones de Monte Carlo

Para confirmar los resultados del análisis variacional, examinamos numéricamente el estado fundamental del Hamiltoniano Ec. 4.10 utilizando simulaciones de Monte Carlo basadas en el método estándar de baño térmico combinado con el método de sobrerrelajación. Hemos implementado condiciones de contorno periódicas para $N = 3600$ sitios. Una simulación en cada campo magnético o temperatura contiene típicamente $0,1 - 1 \cdot 10^6$ pasos de Monte Carlo (MCS's) para la relajación inicial y el doble de MCS durante el cálculo de los valores medios. En el panel inferior de la Fig. 4.11, comparamos la magnetización en función del campo magnético para la solución variacional minimizada y las simulaciones de Monte Carlo son para $D/J = 1/2$. Observamos un acuerdo cualitativo entre ambos métodos. Sin embargo, el comportamiento de la magnetización difiere cuando el sistema cambia de una fase a otra. Esto puede deberse a los efectos de tamaño finito de las simulaciones de MC y al hecho de que en la región de transición, la solución variacional no incluye los modos de orden superior en \mathbf{k} . En la Fig. 4.12 comparamos la energía del estado fundamental como una función del campo magnético obtenido de la minimización de las energías variacionales para las diferentes fases y por medio de simulaciones de Monte Carlo para dos valores de D/J .

Una comparación más detallada de estos enfoques nos permite observar que el diagrama de fases obtenido por medio de la teoría efectiva coincide con los resultados obtenidos por simulaciones de Monte Carlo (ver Fig. 4.13). En Refs. [165, 166] los autores examinaron el diagrama de fases de este sistema en un amplio rango de valores de D/J y B/J , atendiendo especialmente a la región en la que se estabilizan redes de skyrmiones

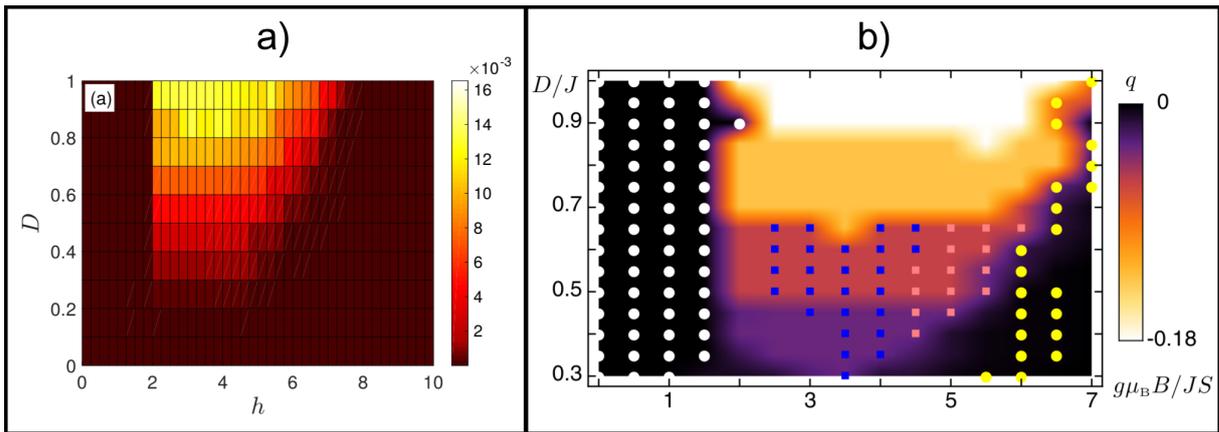


Figura 4.13: (a) Carga topológica χ_L para una temperatura $T = 0,01$ y $N = 48 \times 48$ sitios. Figura extraída de Ref. [165]. (b) Diagrama de fases a baja temperatura $T \approx 0$. Entre las fases magnéticas se encuentran: fase helicoidal a bajo campo magnético (puntos blancos), fase AF-SkX a campos intermedios (cuadrados azules y rosas), y cristal de vórtices, fase de alto campo magnético (puntos amarillos). El código de colores representa la densidad de carga topológica $q = 3Q/N$ (obtenido a partir de simulaciones con $N = 28 \times 28$ y $N = 30 \times 30$). Figura extraída de Ref. [166].

(AF-SkX). Es notable el grado de acuerdo entre estos diagramas de fases (Fig. 4.13) y el deducido a partir de la teoría efectiva (Fig. 4.9). En particular se destaca la presencia de un valor crítico $D_c/J \approx 0,2$ por debajo del cual la fase de redes de skyrmiones es suprimida. La coherencia entre ambos resultados apoya aún más el análisis variacional del límite continuo obtenido a partir del Hamiltoniano efectivo dado por la Ec. 4.34.

Estos resultados nos permiten arribar a la respuesta de la pregunta planteada al inicio de la Sec. 4.3: la frustración geométrica es un elemento necesario para la estabilización de redes de skyrmiones, sin embargo no es suficiente, puesto que para una interacción de Dzyaloshinskii-Moriya suficientemente débil, la fase AF-SkX no es estable.

4.10. Discusión y conclusiones

En este capítulo hemos recorrido la física de las redes de skyrmiones en sistemas antiferromagnéticos. Comenzando por un modelo no frustrado llegamos a la conclusión de que no es posible encontrar redes de skyrmiones (ni skyrmiones aislados) como estados de equilibrio $T = 0$. Como se vió a través de los estudios analíticos, basados en la teoría efectiva para este sistema, una red de skyrmiones tiene mayor energía que los restantes estados: helicoide, Néel cantedo y ferromagnético. Un nuevo ingrediente, la frustración geométrica, se incorpora cuando el modelo en estudio es una red triangular. Este elemento resulta ser fundamental para estabilizar redes de skyrmiones como estado fundamental en este sistema.

Entre los resultados más importantes de este capítulo debemos mencionar la construcción de una teoría de baja energía que describe el comportamiento del modelo de Heisenberg en la red triangular que incluye las interacciones DM y el campo magnético. La teoría de baja energía efectiva dada en la Ec. 4.34, muestra una gran cantidad de fenó-

menos de interés actual en el contexto de las fases magnéticas topológicas. Esta consiste en tres densidades Hamiltonianas, similares a las encontradas por Bogdanov et al. [7, 9] y Hann et al. [115] en el contexto de los sistemas ferromagnéticos. Cada uno de estos admite redes de skyrmiones (SkX) como solución estable. Además de estos términos, hay una contribución de magnetización de plaqueta H_M que acopla a los H_i . La teoría de baja energía predice una fase cristalina AF-SkX que consta de tres redes de skyrmiones interpenetradas, tal como se observó en un trabajo reciente por medio de simulaciones numéricas de Monte Carlo [145]. Además, examinamos numéricamente las propiedades a baja temperatura del modelo microscópico utilizando simulaciones de Monte Carlo, mostrando una muy buena concordancia entre ambos métodos [148].

El Hamiltoniano efectivo que hemos deducido puede servir como punto de partida para estudiar el acoplamiento con cargas eléctricas, vibraciones de la red, desorden estructural y fenómenos de transporte. Por ejemplo se puede estudiar la inclusión de portadores de carga a través del acoplamiento de Hund con la textura magnética, y esto a su vez podría servir como un punto de partida para estudiar los fenómenos de transporte. En este sentido es importante notar que la gran estabilidad que presenta la fase AF-SkX para una amplia gama de campos magnéticos puede tener consecuencias interesantes en el contexto del efecto Hall anómalo.

Capítulo 5

Vórtices en sistemas antiferromagnéticos

“I was taught at school that you should never start a sentence without knowing the end of it.”

Paul Dirac.

RESUMEN: Las configuraciones solitónicas de espín y topológicamente no triviales, conocidas como skyrmions, se estabilizan en ferromagnetos quirales por medio de la interacción DM. En particular, para valores apropiados del campo magnético externo, aparecen en una fase cristalina topológica, denominada fase de cristal de skyrmiones (SkX). Un fenómeno similar está presente en el caso antiferromagnético, para el antiferromagneto triangular de Heisenberg (HTAF) con interacción DM. Aquí, la característica más llamativa es que la fase topológica emergente consiste en tres subredes de skyrmiones interpenetradas. Por otro lado, el HTAF puro, descrito por un parámetro de orden $SO(3)$, puede albergar vórtices \mathbb{Z}_2 . Esto plantea la pregunta fundamental sobre si ambas estructuras no triviales están relacionadas. En este capítulo abordaremos este tema y pondremos en evidencia la existencia de una conexión entre ambas entidades topológicas mediante el estudio de HTAF con una interacción DM anisotrópica. Para este fin, combinamos una descripción efectiva de baja energía, la aproximación de Luttinger-Tisza y simulaciones de Monte Carlo. Mostramos que incluso una ligera anisotropía en la interacción DM resulta ser el ingrediente clave para deformar la estructura SkX interpenetrada y revelar un cristal de vórtices \mathbb{Z}_2 .

5.1. Introducción

Como se ha mencionado en el Capítulo 3, las redes de skyrmiones se pueden estabilizar en sistemas ferromagnéticos. Sin embargo, en el capítulo anterior (Capítulo 4) vimos que en un sistema antiferromagnético, como consecuencia de la frustración magnética, se puede generar un nuevo tipo de fase de red de skyrmiones. En el caso de la HTAF, la estructura magnética periódica se muestra de una manera más compleja: surge como tres

SkX diferentes, uno en cada subred del sistema, que se interpenetran y conducen a un nuevo estado cristalino (ver Refs. [145, 148]) que se denominó AF-SkX (ver también Ref. [166]). La naturaleza de esta intrincada estructura magnética es el principal objeto de estudio en este capítulo.

En la Ref. [44] los autores estudiaron el HTAF (sin interacción DM) a temperatura finita y mostraron que, en relación con la estructura $SO(3)$ del parámetro de orden, se produce una transición de apareamiento-desapareamiento de vórtices \mathbb{Z}_2 . Más recientemente, Rousochatzakis et al. [167] estudiaron el HTAF con interacciones tipo Kitaev y encontraron una fase intermedia en la que los vórtices \mathbb{Z}_2 cristalizan en un arreglo triangular (lo llamamos aquí estado \mathbb{Z}_2X). Notablemente, hemos encontrado que también la estructura AF-SkX puede conducir a una disposición periódica de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 : demostraremos que el ingrediente clave que hace la conexión entre estas dos fases topológicamente diferentes es una interacción DM anisotrópica.

Más precisamente, en este capítulo mostramos que la anisotropía espacial en el término DM dentro de la HTAF (cuyo origen podría ser estructural o inducido artificialmente) se puede usar como un parámetro de sintonización que permite pasar de una configuración no trivial topológicamente suave, la AF-SkX, a una topológicamente singular, una red de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 [168]. Para mostrar esto, primero exploramos los posibles estados modulados a través de la aproximación de Luttinger-Tisza (LT) [169, 170] y luego estudiaremos el diagrama de fases magnético utilizando simulaciones de Monte Carlo (MC). Finalmente, derivamos una teoría de campo efectiva (ET) que proporciona un mayor apoyo a los resultados numéricos. Enfocamos nuestra atención en la aparición de una fase magnética compleja descrita como una red de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 , que en cada subred presenta un arreglo periódico de skyrmiones deformados [168].

5.2. Antiferromagneto de Heisenberg en la red triangular: vórtices \mathbb{Z}_2

El estudio del modelo XY bidimensional, con acomplamiento ferromagnético entre los momentos magnéticos, puso en evidencia la existencia de un nuevo tipo de transiciones de fases que no se puede describir dentro del esquema de la teoría de Landau de transiciones de fases [91, 171, 172]. Esta transición de fase, que se la llama topológica, es conducida por la proliferación de defectos llamados vórtices. En la fase de baja temperatura estos vórtices aparecen formando pares. Al incrementar la temperatura del sistema el número de pares de vórtices crece hasta llegar a una temperatura T_{KT} (temperatura de Kosterlitz-Thoules) en la cual dichos pares se rompen y la física del sistema está dominada por la presencia vórtices libres (ver Apéndice D). Las características de estos vórtices están determinadas por el primer grupo de homotopía del espacio S^1 al cual pertenece el parámetro de orden del sistema ($\pi_1(S^1) \simeq \mathbb{Z}$, ver Sección 2.3.3.2).

Un escenario similar se presenta al estudiar el modelo de Heisenberg antiferromagnético sobre una red triangular:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j, \quad (5.1)$$

con $J > 0$ (acoplamiento antiferromagnético) y \mathbf{m}_i es el momento magnético (clásico)

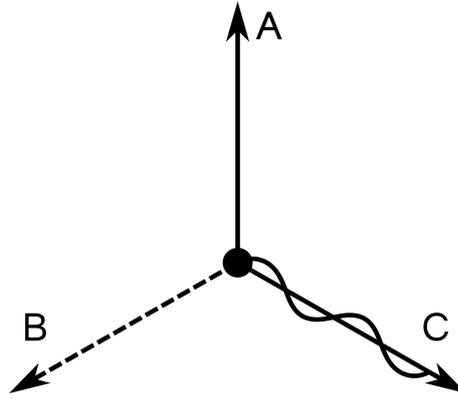


Figura 5.1: Parámetro de orden del antiferromagneto de Heisenberg en la red triangular. Las letras A-C representan cada una de las subredes de la red original.

en el sitio i , que satisface $|\mathbf{m}_i| = 1$. Para ver esto comenzaremos investigando la estructura del parámetro de orden de este modelo. En el estado fundamental los momentos magnéticos están ordenados en una estructura de 120° como se muestra en la Fig. 5.1. El parámetro de orden consiste en tres vectores distinguibles que comparten un plano en común, y por lo tanto tiene la misma estructura que un sistema ortogonal de ejes o un cuerpo rígido en el espacio. En consecuencia el espacio del parámetro de orden es isomorfo al grupo de rotaciones en tres dimensiones $SO(3)$. Una vez que la estructura de 120° es asignada a cada triángulo elemental es posible calcular la vorticidad a lo largo de todos los lazos triangulares que conectan plaquetas adyacentes. De esta forma se puede calcular la densidad de vórtices n_v . En la Fig. 5.2 (a) se muestra la dependencia de n_v con la temperatura y puede observarse un crecimiento abrupto de n_v en una temperatura cercana al máximo del calor específico ubicado en $T/J \approx 0,33$, Fig. 5.2 (b). En la Fig. 5.3 mostramos configuraciones de vórtices para varias temperaturas entre $T/J = 0,28$ y $0,34$. Se puede reconocer la presencia de vórtices \mathbb{Z}_2 formando pares ligados. A medida que la temperatura crece, tanto el número de pares como la distancia entre los vórtices crece, hasta que a $T/J > 0,34$, la aparición de más vórtices dificulta la identificación de pares. Las características de este fenómeno es similar a una transición de Kosterlitz-Thouless, que en este caso es conducida por la disociación de vórtices \mathbb{Z}_2 .

5.3. Antiferromagneto de Heisenberg en la red triangular: redes de vórtices \mathbb{Z}_2

Los vórtices \mathbb{Z}_2 pueden cristalizar si además de la interacción de intercambio se incluye un término de “Kitaev” en el Hamiltoniano del sistema [167, 173]. Este Hamiltoniano está dado por la ecuación

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + J_K \sum_{\gamma, \langle i,j \rangle \parallel \gamma} m_i^\gamma m_j^\gamma. \quad (5.2)$$

El primer término es el modelo de Heisenberg que acopla (con una interacción antiferro-

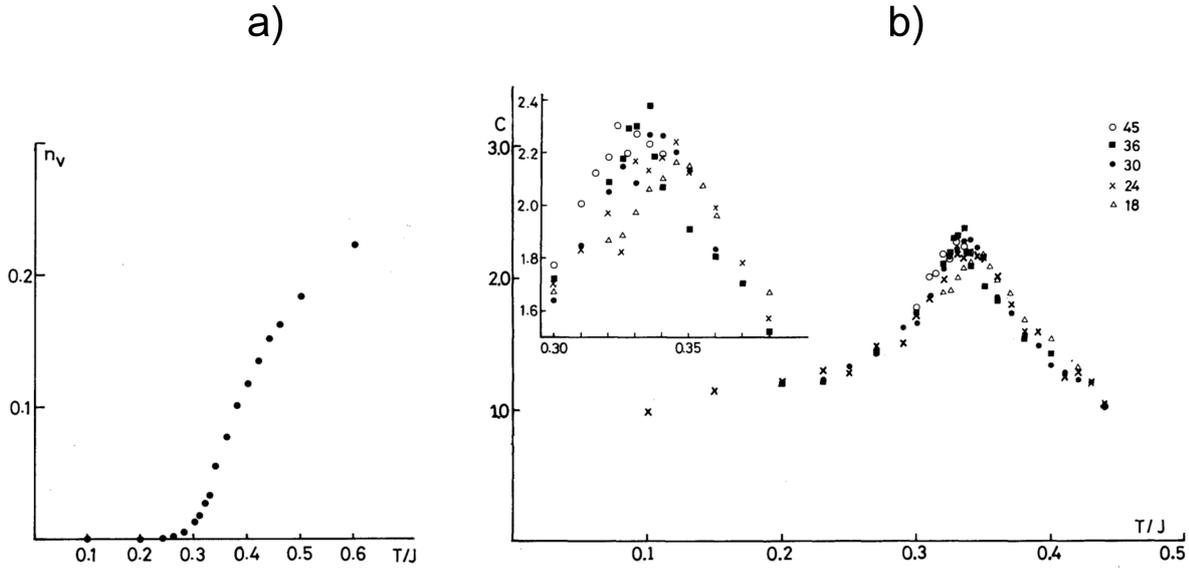


Figura 5.2: (a) Gráfico de la densidad de vórtices \mathbb{Z}_2 como función de T/J . (b) Calor específico como función de T/J . Los distintos tipos de símbolos representan simulaciones de distintos tamaños. El recuadro interior es una ampliación de la zona del pico. Figuras extraídas de Ref. [44].

magnética, $J > 0$) los espines clásicos \mathbf{m}_i con sus primeros vecinos (indicado con $\langle i, j \rangle$) sobre una red triangular. El segundo término, proporcional a J_K , es similar un término de Ising que acopla diferentes componentes del espín \mathbf{m}_i (m_i^γ , $\gamma = x, y, z$) dependiendo de la dirección en la que se encuentre el espín vecino \mathbf{m}_j con el que interactúa (ver Fig. 5.4 (a)). Si $J_K = 0$, el orden de baja temperatura es la estructura de 120° . Cuando la interacción en este término es débil y ferromagnética ($J_K \lesssim 0$) el campo de espines permanece, localmente, en un estado cercano a la configuración de 120° , pero presenta distorsiones a mayores distancias. En consecuencia, el análisis topológico del correspondiente parámetro de orden SO(3) sigue siendo válido y los autores identificaron una fase cristalina formada por un arreglo regular de vórtices \mathbb{Z}_2 (ver Fig. 5.4 (b) y (c)). Es importante señalar aquí que estos defectos son estabilizados por el término de “Kitaev” y persisten incluso a baja temperatura. Esta es una diferencia notable con respecto a lo que ocurre en el modelo de Heisenberg (sin interacciones adicionales) en el que la proliferación de vórtices está asociada a una contribución entrópica a la energía libre del sistema [167].

5.4. Modelo y aproximación de Luttinger-Tisza

Consideremos el siguiente Hamiltoniano microscópico para un sistema de espines clásicos en una red bidimensional triangular:

$$H = \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} [J(\mathbf{m}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{r}'}) + \mathbf{D}_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \cdot (\mathbf{m}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{m}_{\mathbf{r}'})] - \mathbf{B} \cdot \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{m}_{\mathbf{r}}, \quad (5.3)$$

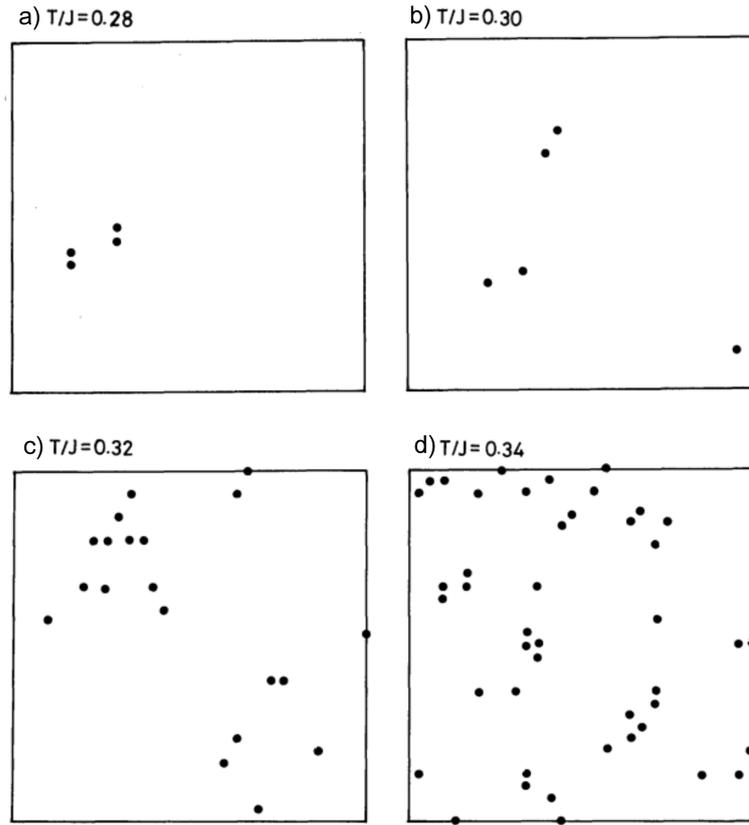


Figura 5.3: Configuraciones de vórtices \mathbb{Z}_2 para distintas temperaturas: (a) $T/J = 0,28$, (b) $T/J = 0,30$, (c) $T/J = 0,32$, (d) $T/J = 0,34$. Figuras extraídas de Ref. [44].

donde el espín es un vector unimodular, $|\mathbf{m}_r| = 1$, $J > 0$ es el acoplamiento de intercambio antiferromagnético y $\mathbf{D}_{r,r'}$ son vectores que representan la interacción DM. En este trabajo consideraremos el efecto de la anisotropía espacial en la interacción DM, controlado a través de dos parámetros D_x, D_y como se muestra en la Fig. 5.5 (a)¹.

Comenzamos buscando posibles estados modulados a temperatura cero y campo magnético cero mediante la aproximación de Luttinger-Tisza (ver Apéndice C para una descripción general de este método).

El método de Luttinger-Tisza (LT), como se considera en nuestro trabajo, se utiliza para la determinación de la configuración de mínima energía de un conjunto de espines clásicos que interactúan entre sí [170, 174]. El método de LT se emplea cuando la energía a minimizar se da como una función cuadrática de los espines y se imponen *condiciones fuertes* adicionales, que determinan el módulo de cada espín. Luego, en la aproximación LT, estas condiciones fuertes se reemplazan por una sola *condición débil*. La aproximación de LT funciona bajo el supuesto de la periodicidad de la configuración de energía más baja del campo de espines.

En ausencia del campo magnético externo, el Hamiltoniano considerado aquí es una

¹Es importante notar que en este caso, al igual que en los considerados en el Capítulo 4, $\sum_i \mathbf{D}^i = \mathbf{0}$. Por lo tanto, gran parte de los resultados deducidos en ese capítulo siguen siendo válidos, en particular la fase SU tendrá una energía independiente de la interacción DM y se puede anticipar que la estructura de la teoría efectiva (que presentaremos en la Sec. 5.6) será la misma que la deducida anteriormente.

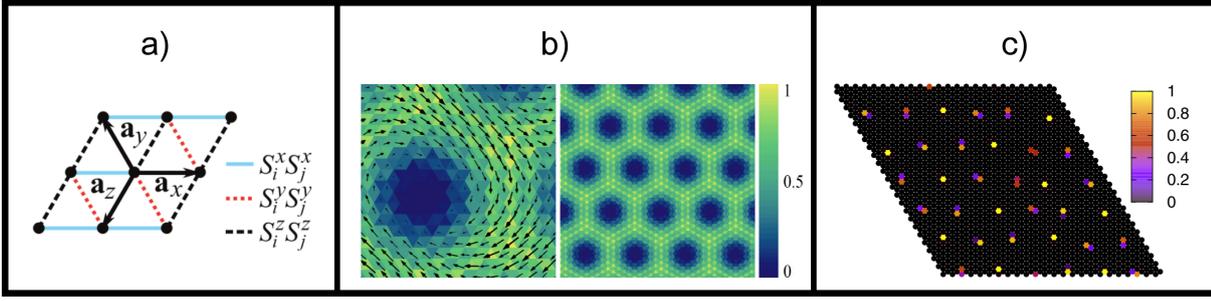


Figura 5.4: (a) Acoplamiento entre los espines correspondientes al término de Kitaev. (b) y (c) Redes de vórtices \mathbb{Z}_2 encontrados en el modelo de Heisenberg-Kitaev. Las figuras (a) y (b) fueron extraídas de la Ref. [173] y la figura (c) de la Ref. [167].

función cuadrática de las variables de espín. Entonces podemos intentar diagonalizar esta forma cuadrática. Sin embargo, al hacerlo, inmediatamente encontramos una dificultad derivada del hecho de que los momentos tienen una longitud unidad ($|\mathbf{m}_i| = 1$, que representa la *condición fuerte*).

Por lo tanto, en el contexto del método LT, la fuerte restricción local $\mathbf{m}_i^2 = 1$ se reemplaza por la condición global $\sum_i \mathbf{m}_i^2 = N$ (*condición débil*) donde N es el número de espines. Para minimizar la energía teniendo en cuenta esta condición débil, agregamos un término con un multiplicador de Lagrange λ al Hamiltoniano del sistema (H):

$$H_\lambda = H - \lambda \left[\sum_i (\mathbf{m}_i^2) - N \right]. \quad (5.4)$$

Por medio de la representación del espín en el espacio de Fourier

$$\mathbf{m}_i = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{m}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{k}}, \quad (5.5)$$

el Hamiltoniano puede ser reescrito de la siguiente manera:

$$H_\lambda = N \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{m}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{k}} - N\lambda \left[\sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{m}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{k}}) - 1 \right]. \quad (5.6)$$

La matriz $\mathbf{M}(\mathbf{k})$ contiene la contribución proveniente de la interacción de intercambio y los términos de DM, $\mathbf{M}(\mathbf{k}) = \mathbf{M}^J(\mathbf{k}) + \mathbf{M}^{DM}(\mathbf{k})$. Estas dos últimas matrices están dadas por:

$$\mathbf{M}_{\alpha,\beta}^J(\mathbf{k}) = 2J\delta_{\alpha,\beta} \left[\cos(k_x) + \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right) \right], \quad (5.7)$$

$$\mathbf{M}_{\alpha,\beta}^{DM}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \tilde{D}^\gamma(\mathbf{k}),$$

$$\tilde{D}(\mathbf{k}) = 2i \left(D_x \left(2 \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) + \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right) \right) \sin\left(\frac{k_x}{2}\right), \sqrt{3}D_y \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right), 0 \right).$$

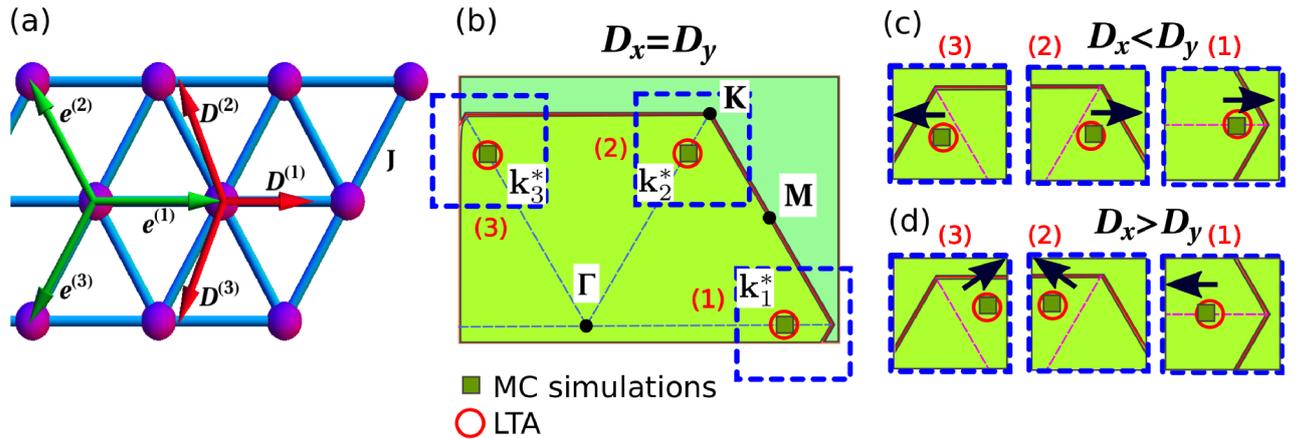


Figura 5.5: (a): Red triangular. Las flechas rojas indican la dirección de los vectores de Dzyaloshinskii-Moriya anisotrópicos dependientes de dos parámetros que controlan la anisotropía espacial: $\mathbf{D}^{(1)} = (D_x, 0)$, $\mathbf{D}^{(2)} = (-D_x/2, \sqrt{3}D_y/2)$ y $\mathbf{D}^{(3)} = (-D_x/2, -\sqrt{3}D_y/2)$. Las flechas verdes sólidas son vectores en la dirección de los primeros vecinos. (b)-(d) Vectores de ordenamiento \mathbf{k}_i^* para (b) $D_x = D_y = 0,35 J$, (c) $D_x = 0,27 J$ y $D_y = 0,35 J$ y (d) $D_x = 0,35 J$ y $D_y = 0,27 J$. Los cuadrados verdes corresponden a los picos de Bragg del factor de estructura en el plano ($\mathbf{m}_\perp(\mathbf{k})$) calculados a partir de 100 configuraciones de MC a $B/J = 2,7$ y $T/J \approx 1 \times 10^{-2}$. Los círculos rojos indican el conjunto de mínimos de $\lambda^-(\mathbf{k})$ obtenidos a partir del método de LT. El hexágono rojo delimita la primera zona de Brillouin de la red triangular. En (c) y (d), las flechas negras representan cualitativamente el desplazamiento de los mínimos de $\lambda^-(\mathbf{k})$ y los picos de $\mathbf{m}_\perp(\mathbf{k})$ con respecto al caso isotrópico.

Minimizando H_λ en la Ec. 5.6 con respecto a $\mathbf{m}_{-\mathbf{k}}$ llegamos a la ecuación:

$$(\mathbf{M}(\mathbf{k}) - \lambda \mathbf{1}) \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{k}} = \mathbf{0}. \quad (5.8)$$

Como estamos interesados en soluciones diferentes de $S_{\mathbf{k}}^\alpha = 0$, el multiplicador de Lagrange debe ser un valor propio de la matriz $\mathbf{M}(\mathbf{k})$, y $\mathbf{m}_{\mathbf{k}}$ debe ser una función propia de la Ec. 5.8.

Usando la Ec. 5.8 y la condición débil (que en el espacio de Fourier está dada por $\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{m}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{k}} = 1$) la energía queda expresada como sigue:

$$E = N\lambda(\mathbf{k}). \quad (5.9)$$

Por lo tanto, debemos encontrar los multiplicadores de Lagrange que son soluciones de la ecuación:

$$\det(\mathbf{M}(\mathbf{k}) - \lambda \mathbf{1}) = 0, \quad (5.10)$$

y que a su vez minimizan la Ec. 5.9, y las correspondientes autofunciones de la Ec. 5.8. La ecuación de autovalores (ec. 5.10) tiene tres soluciones que llamamos $\lambda_-(\mathbf{k})$, $\lambda_0(\mathbf{k})$ y $\lambda_+(\mathbf{k})$. Para $D_x = D_y = 0$ las tres soluciones se superponen completamente ($\lambda^+(\mathbf{k}) = \lambda^0(\mathbf{k}) = \lambda^-(\mathbf{k})$) y el orden corresponde a una estructura de 120° , con el vector de onda $\mathbf{k} = (4\pi/3, 0)$. Para la interacción DM distinta de cero ($D_x \neq 0$ o $D_y \neq 0$) hay una

D_x/J	D_y/J	\mathbf{k}_1^*	\mathbf{k}_2^*	\mathbf{k}_3^*
0.35	0.27	(3.801, 0)	(1.848, 3.423)	(-1.848, 3.423)
0.35	0.35	(3.801, 0)	(1.901, 3.292)	(-1.901, 3.292)
0.27	0.35	(3.894, 0)	(1.965, 3.284)	(-1.965, 3.284)

Tabla 5.1: Conjunto de mínimos no equivalentes obtenidos por la aproximación de Luttinger-Tisza.

superficie mínima $\lambda^-(\mathbf{k})$ que no se cruza con las otras bandas y, por lo tanto, el orden magnético se determina por sus mínimos \mathbf{k}^* .

Existen tres mínimos locales no equivalentes \mathbf{k}_i^* indicados en la Fig. 5.5 (b)-(d). Para el caso isotrópico, los mínimos se encuentran en los vértices de un hexágono regular, los tres mínimos son equivalentes [145, 148] y tienen la misma energía. En el caso anisotrópico, $D_x \neq D_y$, los mínimos están distribuidos a lo largo de un hexágono irregular. En este caso, tenemos $\lambda^-(\mathbf{k}_1^*) \neq \lambda^-(\mathbf{k}_2^*) = \lambda^-(\mathbf{k}_3^*)$. Si $D_x < D_y$ entonces $\lambda^-(\mathbf{k}_1^*) > \lambda^-(\mathbf{k}_{2,3}^*)$, si $D_x > D_y$ entonces $\lambda^-(\mathbf{k}_1^*) < \lambda^-(\mathbf{k}_{2,3}^*)$. En la tabla 5.1 enumeramos el conjunto de mínimos no equivalentes.

Este resultado expresa la posible existencia de una fase con un orden magnético modulado con un \mathbf{k}^* definido, aquel para el cual λ^- toma el mínimo absoluto. Sin embargo, dado que la diferencia entre la energía del mínimo absoluto y el local es pequeña ($\approx 1\%$), la presencia del campo magnético externo y la temperatura podrían mezclar todos estos modos, estabilizando un estado *triple-q*. Veremos en la próxima sección que las simulaciones de Monte Carlo confirman este escenario.

5.5. Simulaciones de Monte Carlo: estudio del factor de estructura para la fase AF-SkX

La presencia de esta fase triple-q (en campo magnético y temperatura finitos) sin las restricciones impuestas por la aproximación LT, puede ser confirmada por las simulaciones clásicas de MC del Hamiltoniano dado en la Ec. 5.3. Para este fin, estudiamos las componentes paralela y perpendicular (al eje z) del factor de estructura

$$\mathbf{m}_{\parallel}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{\mathbf{r}} m_{\mathbf{r}}^z e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right|^2 \right\rangle, \quad (5.11)$$

$$\mathbf{m}_{\perp}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{\mathbf{r}, \alpha=x,y} m_{\mathbf{r}}^{\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right|^2 \right\rangle. \quad (5.12)$$

En la Fig. 5.5 presentamos los resultados para $\mathbf{m}_{\perp}(\mathbf{k})$ (la componente $\mathbf{m}_{\parallel}(\mathbf{k})$ tiene el mismo comportamiento y no se incluye aquí) para $B/J = 2,7$ y $T/J = 10^{-2}$. Observamos la presencia de un patrón de tres picos donde las posiciones de los mínimos son modificadas por la interacción DM anisotrópica. La posición de estos picos puede compararse con los mínimos encontrados con el método de LT, mostrando una excelente concordancia en el

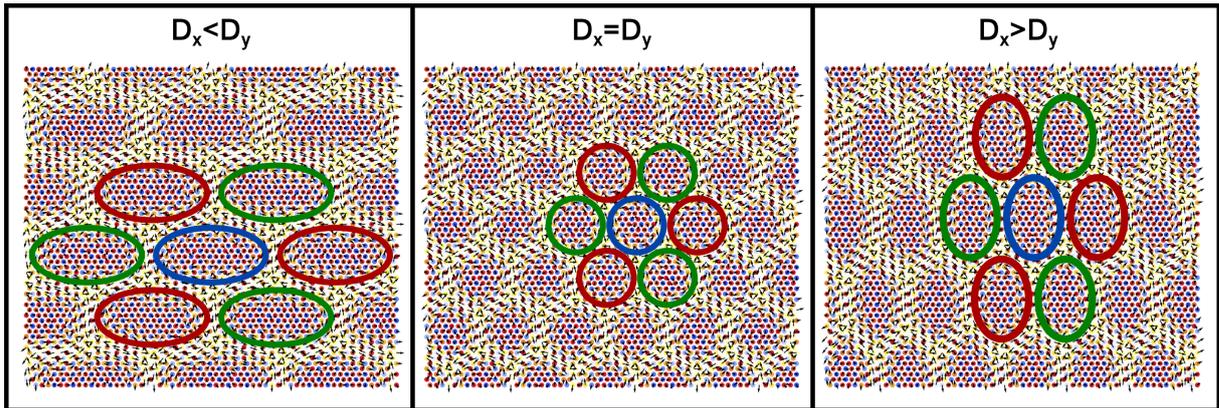


Figura 5.6: Configuración de espín (red completa) obtenida por simulaciones de Monte Carlo para $B/J = 2,7$ y $T/J \approx 10^{-2}$. La estructura de tres subredes de skyrmiones interpenetradas es ilustrada por medio de elipses (o círculos) que encierran el núcleo de un skyrmión de alguna de las subredes (identificada con los colores azul, rojo y verde). Las figuras corresponden a distintos valores de D_x y D_y , de izquierda a derecha: $D_x/J = 0,27$ y $D_y/J = 0,35$, $D_x/J = D_y/J = 0,35$, y $D_x/J = 0,35$ y $D_y/J = 0,27$.

desplazamiento producido por la anisotropía (ver Fig. 5.5). La similitud entre los factores de estructura para los casos isotrópico y anisotrópico, sugiere que una estructura de espín interpenetrada también podría estar presente en el caso anisotrópico [145, 148].

El análisis del diagrama de fases de baja temperatura (que discutiremos en detalle en la Sec. 5.6) para el caso anisotrópico proporciona resultados similares a los del caso isotrópico (estudiado en el Cap. 4). En particular para campos intermedios $2,2 < B/J < 5$, la fase AF-SkX es estabilizada (ver Fig. 5.8). La principal diferencia es que, en cada red interpenetrada, la anisotropía conduce a skyrmiones elípticos (ver Fig. 5.6 y Fig. 5.7). Los skyrmiones se elongan a lo largo de la dirección \hat{y} (\hat{x}) para $D_x > D_y$ ($D_x < D_y$) y están ubicados en los vértices de triángulos isósceles (en lugar de equiláteros, como ocurre en el caso isotrópico).

5.6. Diagrama de fases

El diagrama de fases obtenido de las simulaciones de Monte Carlo y el enfoque variacional de la teoría de campo (ET) se muestran en la Fig. 5.8. Además, se muestra una textura magnética representativa para cada fase (para una subred y la red completa).

A partir de las simulaciones de Monte Carlo vemos que la fase AF-SkX existe para campos magnéticos intermedios ($2 \lesssim B/J \lesssim 5$). Los skyrmiones se alargan a lo largo de \hat{x} para $D_y > D_x$ (y viceversa) cuando aumenta la anisotropía en la interacción DM, y también cambia su disposición triangular. La fase de campo bajo es el estado helicoidal (HL). Existe una fase de campo alto que puede describirse como una fase de vórtices (VX) [145, 166]² y finalmente en campos más altos se alcanza el estado polarizado en la

²Si bien nos referimos a la fase VX como fase de vórtices, estos no deben ser confundidos con los vórtices \mathbb{Z}_2 . La estructura de los primeros se evidencia en el propio campo de espines (en cada subred),

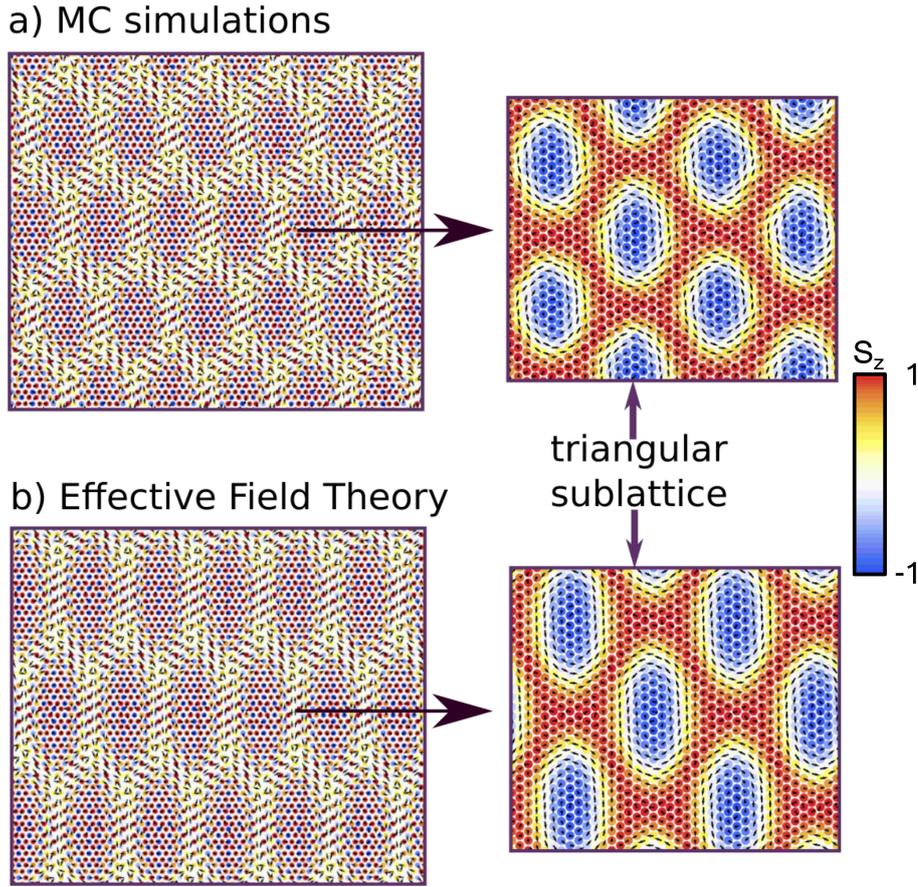


Figura 5.7: Configuración de espín para la red completa (izquierda) y para una subred (derecha) para $D_x/J = 0,35$, $D_y/J = 0,27$ y $B/J = 2,7$ obtenidos de (a) simulaciones de MC a $T/J \approx 10^{-2}$ y (b) la discretización del campo de espines a partir de los resultados de la ET. Las flechas representan los componentes xy del espín, la escala de colores representa la componente m_z (el azul para $m_z = -1$ y el rojo para $m_z = 1$).

dirección del campo magnético (FM). Es importante mencionar que para un valor dado de D_x (D_y) existe un valor crítico mínimo de D_y (D_x), debajo de este valor crítico se suprime la fase AF-SkX, y un estado helicoidal, propagándose a lo largo de la dirección \hat{x} (\hat{y}), aparece en su lugar.

Para seguir analizando el diagrama de fases de este sistema a medida que incrementamos la anisotropía en la interacción DM, extendemos el enfoque de la teoría de campo efectiva (siguiendo las mismas líneas que en los capítulos anteriores). Consideramos un conjunto de Ansätze variacionales para describir la fase AF-SkX, con la modificación de que los \mathbf{k}_i ($i = 1, 2, 3$, que expanden la fase SkX representada como una fase triple-q) no son de la misma longitud y no forman un ángulo de 120° . Sin embargo, aún deben satisfacer la condición $\sum_i \mathbf{k}_i = \mathbf{0}$, con dos vectores de la misma longitud y diferentes del tercero: $|\mathbf{k}_1| \neq |\mathbf{k}_2| = |\mathbf{k}_3|$ [108]. Los términos que contienen derivadas de \mathbf{M} ($\nabla^2 \mathbf{M}$, $\partial_x \mathbf{M}$ y $\partial_y \mathbf{M}$) son despreciables para la fase AF-SkX considerada aquí [148]. Así, el Hamiltoniano

mientras que los vórtices \mathbb{Z}_2 se manifiestan en el campo de quiralidad ($\boldsymbol{\kappa}$) que da cuenta de la orientación de la estructura de 120° (ver Fig. 5.1), a la que podemos asociar una matriz de $\text{SO}(3)$.

mínimo para describir esta fase está dado por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_M + \sum_{i=1}^3 \mathcal{H}_i, \\
\mathcal{H}_M &= \frac{J}{2}(\mathbf{M}^2 - 3), \\
\mathcal{H}_i &= -a^2 \frac{J}{8} \mathbf{m}_i \cdot \nabla^2 \mathbf{m}_i - \frac{1}{3} \mathbf{B} \cdot \mathbf{M} - \\
&\quad - \frac{a}{4} \mathbf{m}_i \cdot [D_x (\partial_x \mathbf{m}_i \times \hat{\mathbf{x}}) + D_y (\partial_y \mathbf{m}_i \times \hat{\mathbf{y}})] .
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Con este Hamiltoniano y generalizando el Ansatz usado en la Ref. [148] para el caso anisotrópico, encontramos que para los campos magnéticos $2,4 < B/J < 4,5$ emerge una fase SkX modificada en cada subred de espín (ver Fig. 5.7). Como se muestra en los resultados de MC, estas estructuras de red de skyrmiones por subred, pueden describirse como skyrmiones elípticos dispuestos en una red triangular con uno de sus lados alargados. La misma configuración de skyrmiones elípticos se encontró en el contexto de ferromagnetos quirales con interacción DM anisotrópica [108, 109].

El diagrama de fases obtenido a partir de la ET es consistente con los resultados de MC previos como se muestra en la Fig. 5.8. Hay un estado que llamamos “uniforme por subred” (SU) [148] en el que el campo de espines en cada subred es uniforme y satisfacen la relación:

$$\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3 = \mathbf{B}/3J. \tag{5.14}$$

En la tercera columna de la fila inferior de la Fig. 5.8 mostramos una configuración del campo de espines representativa de la fase SU. Sin embargo, vale la pena mencionar que esta configuración no es única ya que el único requisito es que la magnetización ($\mathbf{M} = \mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3$) está determinada por la condición de la Ec. 5.14, por lo que hay una degeneración residual.

5.7. Vórtices \mathbb{Z}_2

Como mostramos a continuación, los skyrmiones elípticos organizados en el patrón triangular distorsionado en cada subred, promueven la aparición de una red de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 . Como hemos mencionado al comienzo de este capítulo, en ausencia de la interacción DM y para campos magnéticos muy pequeños, el HTAF se puede describir mediante un parámetro de orden $SO(3)$ [44, 167, 173]. A partir de la descripción de $SO(3)$, las configuraciones de espín del sistema antiferromagnético triangular se pueden clasificar por el primer grupo de homotopía $\pi_1(SO(3)) \approx \mathbb{Z}_2$. Esto significa que, desde un punto de vista topológico, solo existen dos configuraciones no equivalentes, la configuración trivial (no singular) y luego una no trivial (singular). Para entender la existencia de estas dos clases de configuraciones debemos revisar las propiedades del espacio $SO(3)$. En primer lugar podemos identificar al espacio del parámetro de orden $SO(3)$ con una esfera (con el interior incluido) de radio π . El elemento asociado al centro (que llamaremos o) de la esfera corresponde a la identidad y un elemento arbitrario de $SO(3)$ es representado en este espacio por un punto p . El radiovector \mathbf{n}_{op} (que comienza en el punto o y termina en

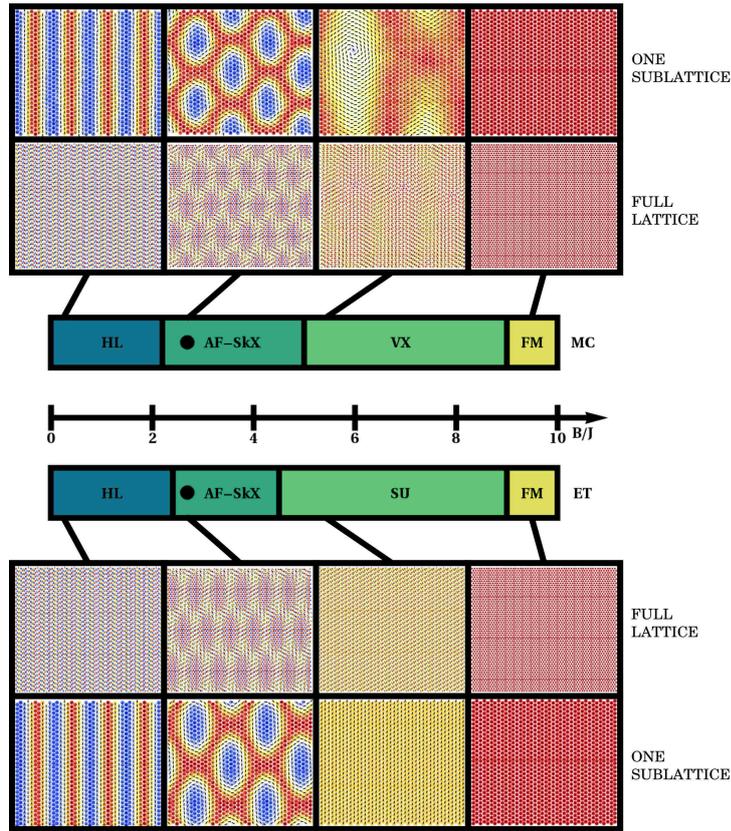


Figura 5.8: Representación esquemática del diagrama de fases para el modelo con interacción de Dzyaloshinskii-Moriya anisotrópica ($D_x/J = 0,35$ y $D_y/J = 0,27$) a partir de simulaciones de Monte Carlo a baja temperatura (panel superior) y de la teoría efectiva (panel inferior). Se muestra una configuración representativa del campo de espines (de la red completa y de una de las subredes) en cada fase, obtenidos por simulaciones de Monte Carlo (panel superior) y de la teoría efectiva (panel inferior). De izquierda a derecha los valores del campo magnético correspondiente a cada configuración mostrada son $B/J = 0,08, 2,7, 5,5$ y $9,5$ respectivamente. El punto negro corresponde a un valor de $B/J = 2,7$ en los que calculamos los factores de estructura de la Fig. 5.5.

el punto p) define una rotación alrededor del vector $\hat{\mathbf{n}}_{op}$ en un ángulo $|\mathbf{n}_{op}|$. Un elemento ubicado en el borde la esfera, al que le corresponde un vector de la forma $\hat{\mathbf{n}}_0\pi$, representa a una rotación en π alrededor de $\hat{\mathbf{n}}_0$. Este objeto a su vez es idéntico a una rotación en π pero en la dirección contraria, es decir en torno a $-\hat{\mathbf{n}}_0$, por este motivo los puntos sobre el borde de la esfera y diametralmente opuestos corresponden al mismo elemento de $SO(3)$. Con esta estructura, en el espacio $SO(3)$ es posible identificar dos tipos de lazos: (ver Fig. 5.9), aquellos que recorren $SO(3)$ un número par de veces y por ende son contraíbles a la identidad (lazos triviales, Fig. 5.9 (a)), y aquellos que lo recorren un número impar de veces y no son contraíbles a la identidad (lazos no triviales, Fig. 5.9 (b)).

Para estudiar la posible aparición de estos vórtices \mathbb{Z}_2 en el modelo distorsionado,

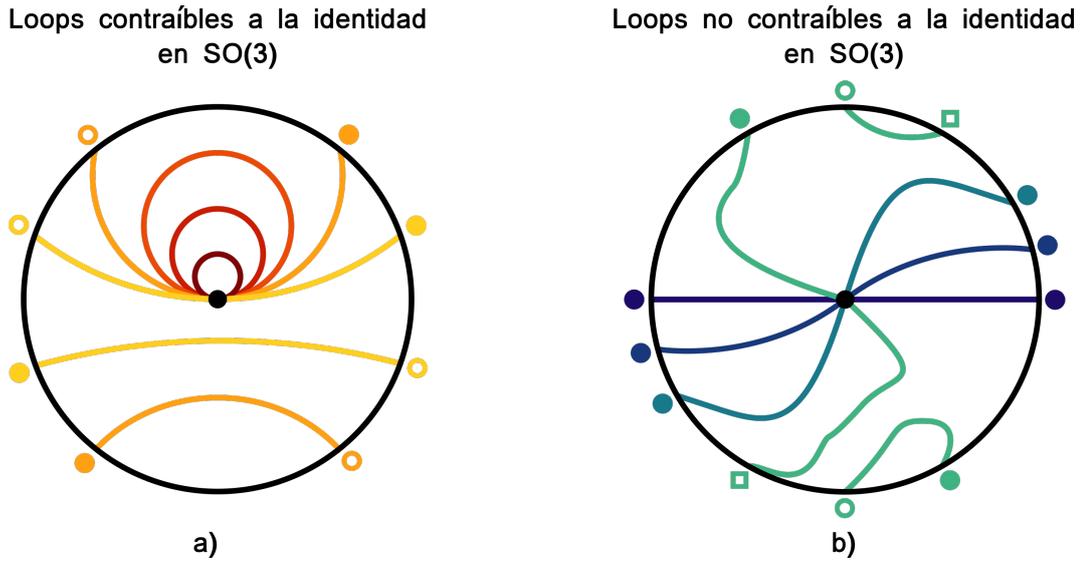


Figura 5.9: Lazos en $SO(3)$. El punto negro en el centro representa la identidad, mientras que el círculo exterior negro representa rotaciones en π . Los puntos sobre el borde, y diametralmente opuestos, están identificados entre sí. Los puntos sobre el borde del espacio $SO(3)$, indicados con círculos llenos, círculos vacíos o cuadrados, son puntos de continuación de las correspondientes trayectorias (definidas por un color específico). De este modo, una trayectoria que termina en uno de estos símbolos, continúa en el símbolo diametralmente opuesto y del mismo color. (a) Ejemplos de lazos contraíbles a la identidad (triviales). (b) Ejemplos de lazos no contraíbles a la identidad (no triviales).

introducimos el campo vectorial de quiralidad siguiendo la definición de Ref. [44]:

$$\boldsymbol{\kappa} = \frac{2}{3\sqrt{3}} (\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_2 \times \mathbf{m}_3 + \mathbf{m}_3 \times \mathbf{m}_1). \quad (5.15)$$

Este vector, en ausencia del término DM, es perpendicular al plano de la estructura de 120° . Su módulo, $0 \leq |\boldsymbol{\kappa}| \leq 1$, proporciona información sobre el grado de deformación de la estructura de 120° , se anula cada vez que dos espines son paralelos y da $|\boldsymbol{\kappa}| = 1$ cuando se alcanza la configuración plana de 120° .

Para calcular la vorticidad, asignamos un triedro (cuerpo rígido) a cada plaqueta triangular asociada con su configuración de espín. Este triedro está representado por tres vectores unimodulares mutuamente ortogonales construidos a partir del campo de espín. Elegimos los vectores como se indica en la Ref. [44]: el primer vector es elegido en la dirección del vector quiralidad $\mathbf{n}_1 = \hat{\boldsymbol{\kappa}}$, el segundo vector es elegido en la dirección $\mathbf{n}_2 = (\mathbf{n}_1 \times \mathbf{m}_i) \times \mathbf{n}_1$ donde \mathbf{m}_i es el vector de espín en una subred dada, y el tercero es el producto cruz de los dos anteriores, $\mathbf{n}_3 = \mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2$. El cuerpo rígido se transforma de un punto p a otro punto p' a través de una matriz $\mathbf{R} \in SO(3)$. Siguiendo la prescripción introducida por Kawamura y Miyashita, podemos asignar una matriz de $SU(2)$ única (esta representación es de dos a uno, dos elementos de $SU(2)$ corresponden al mismo elemento de $SO(3)$) a cada matriz de $SO(3)$ a lo largo de la línea que conecta dos puntos adyacentes de la red de la plaquetas. Llamamos \mathbf{U}_i a la matriz asociada con la i -ésima de estas líneas. Como vimos en la Sec. 2.3.7.2, la vorticidad \mathcal{V}_C para una trayectoria cerrada C se define,

como [44]

$$\mathcal{V}_C = \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \prod_{i \in C} \mathbf{U}_i \right\}, \quad (5.16)$$

suponiendo que el grupo \mathbb{Z}_2 está representado por los elementos $\{-1, 1\}$ con el producto habitual, la vorticidad toma el valor $\mathcal{V}_C = -1$ ($\mathcal{V}_C = +1$) para las trayectorias que encierran un número impar (par) de vórtices. Los lazos más pequeños en la red triangular de la plaqueta corresponden a los triángulos no equivalentes que llamamos C_{\triangleleft} y C_{\triangleright} . Estos triángulos conectan tres plaquetas adyacentes y no se superponen entre sí (a excepción de los vértices y lados que podrían tener en común).

5.7.1. Simulaciones de Monte Carlo

En la Fig. 5.10 mostramos la quiralidad κ dada por la Ec. 5.15 en cada plaqueta de la red. Como en los estudios anteriores [44, 173], aquí los vórtices \mathbb{Z}_2 se sitúan sobre los ceros de la componente xy del campo vectorial de quiralidad, con un índice no trivial [175]. Presentamos los resultados para tres casos representativos: $D_x > D_y$, $D_x = D_y$ (caso isotrópico) y $D_x < D_y$, para las simulaciones de MC (Fig. 5.10 (a)) a bajas temperaturas ($T \approx 10^{-2}J$) y por medio del análisis de la ET a temperatura cero (Fig. 5.10 (b)). La localización de los vórtices se determina a partir de las configuraciones de MC mediante el cálculo de la vorticidad alrededor de las curvas cerradas más pequeñas. Calculamos, entonces, la vorticidad para todos los triángulos C_{\triangleleft} y C_{\triangleright} . Los triángulos verdes son aquellos para los cuales $\mathcal{V} = -1$ que indica la presencia de un vórtice en esa posición de la red. Reconocemos pares de vórtices en las regiones donde el módulo de κ es mínimo y la quiralidad en el plano es cero [168].

En el caso isotrópico podemos ver que los vórtices están casi superpuestos y la dirección de la separación está orientada de manera aleatoria. Por otro lado, la presencia de anisotropía $D_x \neq D_y$ aumenta la separación entre los vórtices. La dirección de separación está determinada por la anisotropía de tal modo que si $D_y > D_x$ ($D_x > D_y$) se alejan uno de otro en la dirección \hat{x} (\hat{y}) como se muestra en la Fig. 5.10 (a). Los contornos verdes (en los paneles inferiores de la Fig. 5.10 (a)) son aquellos en los que contamos una vorticidad negativa que indica que este contorno rodea un vórtice. Para el lazo azul (que encierra las regiones delimitadas por los dos lazos verdes), tenemos $\mathcal{V} = 1$, lo que significa que contiene un número par de vórtices, como es de esperar para esta cantidad.

5.7.2. Teoría de campo efectiva

Para seguir analizando el aspecto de la red \mathbb{Z}_2X a medida que incrementamos la anisotropía en el término DM, empleamos los campos de espines obtenidos por el enfoque variacional para estudiar la presencia de vórtices \mathbb{Z}_2 .

Los círculos rellenos de color verde en la Fig. 5.10 (b) representan las posiciones de los vórtices. En el caso isotrópico, el mínimo de $|\kappa|$ no corresponde a los vórtices, ya que para cada curva cerrada, encontramos que la vorticidad es $\mathcal{V} = 1$, es decir, no hay vórtices. Sin embargo, podemos ver que aparece un par de vórtices cuando existe anisotropía, como se representa en los paneles izquierdo y derecho de la Fig. 5.10 (b). Como se muestra en los paneles inferiores, para un lazo que encierra solo un mínimo (círculo verde), la vorticidad

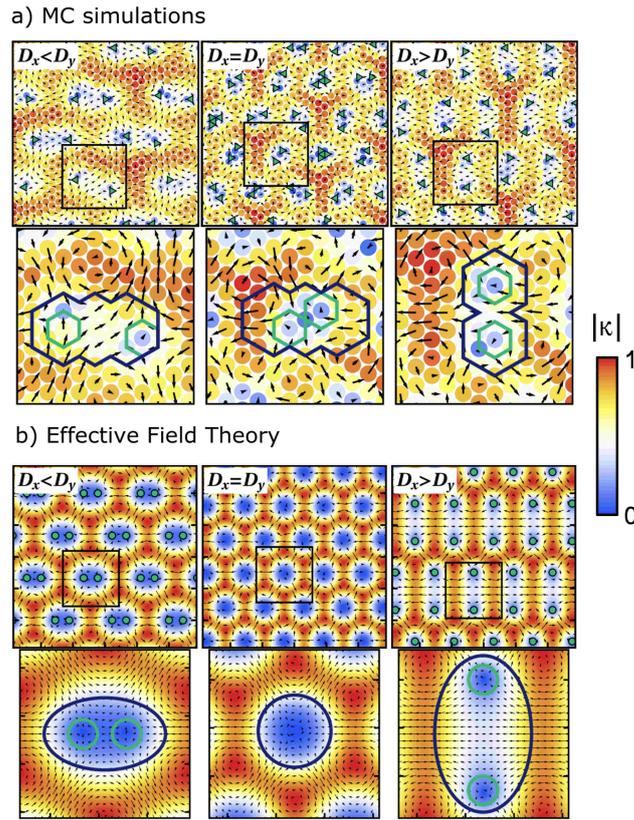


Figura 5.10: Configuración de vórtices para diferentes valores de D_x , D_y en $B/J = 2,7$. En el lado izquierdo, $D_y/D_x = 1,3$ ($D_y/J = 0,35$), en el panel central $D_x/D_y = 1$ ($D_x/J = 0,35$), y el panel derecho es para $D_y/D_x = 0,77$ ($D_x/J = 0,35$). Las segundas filas corresponden a una ampliación de la región delimitada por los cuadrados negros interiores. En estas regiones ampliadas, la vorticidad es $\mathcal{V} = -1$ a lo largo de las curvas verdes y $\mathcal{V} = 1$ para las curvas azules. (a) Resultados de simulaciones de MC en $T/J \approx 10^{-2}$. Los triángulos verdes representan la posición de los vórtices. (b) Resultados de la ET. Los puntos verdes indican la posición de los vórtices. Las flechas corresponden a la componente en el plano del vector de quiralidad ($\boldsymbol{\kappa}$) y el color representa su longitud, azul (rojo) para $|\boldsymbol{\kappa}| = 0$ ($|\boldsymbol{\kappa}| = 1$).

es $\mathcal{V} = -1$, mientras que para un lazo que encierra dos mínimos (azul) la vorticidad es $\mathcal{V} = 1$. Una vez más, la separación de los vórtices es determinada por la anisotropía y se lleva a cabo a lo largo de la dirección $\hat{\mathbf{y}}$ ($\hat{\mathbf{x}}$) para $D_x > D_y$ ($D_y > D_x$). Estos resultados coinciden con los obtenidos a partir de simulaciones de MC. De todo esto, concluimos que aparecen pares de vórtices en el estado fundamental, formando una red triangular, cuando la interacción DM presenta anisotropía. En el límite isotrópico, estos pares de vórtices se superponen dando como resultado una configuración topológicamente suave, mientras que en el caso de la interacción DM anisotrópica, los vórtices se separan, y la configuración se vuelve topológicamente singular. Debemos tener en cuenta que dentro de la teoría de campo efectiva, la distancia de la red se establece de manera efectiva en cero, mientras que en las simulaciones de MC la existencia de una longitud mínima (el parámetro de red del sistema) produce un desajuste en la forma en la que se interpenetran las redes de

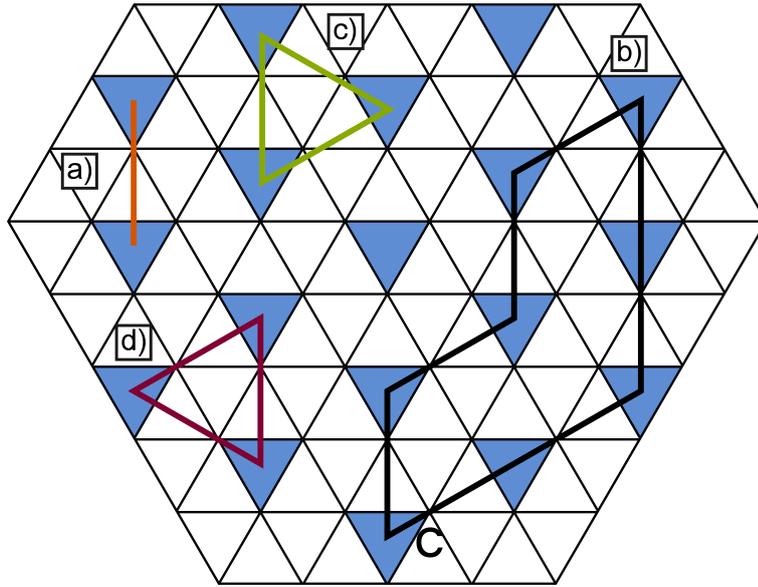


Figura 5.11: Red de plaquetas (triángulos azules) sobre la red triangular original. Se muestran ejemplos de trayectorias que conectan plaquetas adyacentes. (a) Segmento que conecta dos plaquetas. (b) Contorno cerrado C . (c) y (d) Ejemplos de los contornos cerrados más pequeños posibles que los llamamos $C_{>}$ y $C_{<}$, respectivamente.

skyrmiones y, por lo tanto, se observan pares de vórtices muy próximos entre sí en el caso isotrópico.

5.8. Cálculo de la vorticidad

En general cualquier rotación de $SO(3)$ (caracterizada por un ángulo y una dirección de rotación ω y $\hat{\mathbf{n}}$, respectivamente) puede ser representada por las siguientes dos matrices de $SU(2)$ de signos opuestos:

$$\mathbf{U} = \pm \exp \left[\frac{\omega}{2i} \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right], \quad (5.17)$$

donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli [176]. Estas dos matrices pueden ser intercambiadas entre sí por medio del reemplazo $\omega \leftrightarrow 2\pi - \omega$ y $\hat{\mathbf{n}} \leftrightarrow -\hat{\mathbf{n}}$. Por lo tanto es posible elegir una matriz de $SU(2)$ con la condición $-\pi < \omega < \pi^3$. De este modo podemos asignar unívocamente una matriz de $SU(2)$ a cada línea que conecta dos plaquetas (ver Fig. 5.11 (a)).

Consideremos un contorno cerrado C en la red de plaquetas (ver Fig. 5.11 (b)). Podemos construir el producto de todas las matrices $SU(2)$ asignadas a cada uno de los links

³Es importante notar que bajo esta restricción estamos eligiendo matrices \mathbf{U} cuya traza es siempre positiva o siempre negativa (y no alterna entre un signo y otra al variar ω). En efecto si usamos el desarrollo [176]:

$$\pm \exp \left[\frac{\omega}{2i} \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] = \pm \left(\mathbf{1} \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) - i \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \right), \quad (5.18)$$

vemos que $\text{Tr}\{\mathbf{U}\} = \pm 2 \cos(\frac{\omega}{2})$ y por lo tanto tiene signo definido si $-\pi < \omega < \pi$.

en el camino cerrado:

$$\prod_{i \in C} \mathbf{U}_i = \mathbf{U}_N \mathbf{U}_{N-1} \cdots \mathbf{U}_2 \mathbf{U}_1. \quad (5.19)$$

Debemos notar que el orden en el que se multiplican las matrices \mathbf{U}_i es importante porque $SU(2)$ no es un grupo abeliano⁴. De la definición 5.19, es evidente que esta cantidad es igual a $\mathbb{1}$ o $-\mathbb{1}$ donde $\mathbb{1}$ es la matriz identidad (de 2×2). Por lo tanto de la definición de la vorticidad en Ec. 5.16, vemos que \mathcal{V}_C puede tomar solo dos valores, $\mathcal{V}_C = \pm 1$.

De la definición de Ec. 5.16 arrivamos a la siguiente ley de conservación de la vorticidad. Si un contorno cerrado C consta de dos partes C_1 y C_2 cada uno de los cuales posee una vorticidad \mathcal{V}_{C_1} y \mathcal{V}_{C_2} , la vorticidad total está dada por $\mathcal{V}_C = \mathcal{V}_{C_1} \mathcal{V}_{C_2}$ ⁵.

Si bien en las definiciones introducidas para el cálculo de la vorticidad se recurrió a una red (discreta) de puntos, se puede generalizar a un espacio continuo. Para esto hacemos una partición del contorno cerrado en una serie de segmentos y aplicamos el procedimiento anterior para cada uno de ellos.

5.9. Número de Vórtices como función de la temperatura

Los resultados discutidos en las secciones anteriores sugieren que por cada skyrmión (en alguna de las subredes) podemos identificar un par de vórtices \mathbb{Z}_2 en la red total en el estado fundamental del sistema. Para reforzar esta idea podemos estudiar como varía el número de vórtices N_v ⁶ como función de la temperatura. Como puede verse en la Fig. 5.12 (a) esta curva tiene un comportamiento similar al observado por Kawamura y Miyashita [44]. Al aumentar la temperatura el número de vórtices crece y en particular existe una temperatura ($T/J \approx 0,33$, cercana a la temperatura T_{KM}) a partir de la cual este crecimiento es más pronunciado. Sin embargo en el régimen de baja temperatura surge una diferencia muy notable ya que el número de vórtices no es nulo en esta región, lo que indica que existen vórtices incluso en el estado fundamental. Si bien esta observación es consistente con lo que hemos presentado en las secciones anteriores, respecto a la existencia de vórtices \mathbb{Z}_2 en el estado fundamental del sistema, no provee información que vincule a los skyrmiones con los vórtices. Si en cambio consideramos el cociente entre el número de vórtices (N_v) a una temperatura dada y el número de skyrmiones (N_s) en el estado fundamental, podemos encontrar indicios de la relación que existe entre estos objetos. En

⁴Por este motivo el producto en el lado izquierdo de la Ec. 5.19 debe ser calculado como la composición a izquierda de las matrices \mathbf{U}_i .

⁵Esta es una diferencia importante entre los vórtices \mathbb{Z}_2 y los vórtices usuales \mathbb{Z} . Para los vórtices \mathbb{Z} , que se pueden encontrar en el modelo XY , la ley de conservación se refiere a la suma de número de vórtices (o "winding") de cada vórtice.

⁶El número total de vórtices (N_v) en el sistema, lo calculamos sumando las contribuciones de todos los lazos más pequeños de la red de plaquetas. Es decir

$$N_v = \sum_{C \in \{C_{\triangleright}, C_{\triangleleft}\}} \mathcal{V}_C, \quad (5.20)$$

donde \mathcal{V}_C se calcula sobre cada uno de los lazos más pequeños de la red (que llamamos C_{\triangleright} y C_{\triangleleft}), y la suma se realiza sobre todos ellos.

efecto, en la Fig. 5.12 (b) se grafica el cociente N_v/N_s como función de la temperatura y puede observarse que las tres curvas tienden a un mismo valor $N_v/N_s \approx 2$ en el límite de bajas temperaturas (ver Fig. 5.12 (c)). Este resultado da sustento a nuestra hipótesis de que existen vórtices \mathbb{Z}_2 en el estado fundamental del sistema y que a cada skyrmión se le puede asociar un par de vórtices.

5.10. Resumen

En resumen, en este capítulo hemos estudiado la conexión entre la estructura topológica presente en la fase AF-SkX y la de los vórtices \mathbb{Z}_2 formados por el vector de quiralidad. Para llevar a cabo esta tarea, hemos recurrido a una combinación de técnicas, que incluyen una descripción mediante una teoría de campos efectiva, la aproximación de Luttinger-Tisza y las simulaciones de Monte Carlo. Nuestro resultado más importante es que en la fase AF-SkX, compuesta por tres redes interpenetradas de skyrmiones ferromagnéticos, una pequeña anisotropía en la interacción DM induce la aparición de una red periódica de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 que cubren toda la textura magnética. Para detectar esta estructura de vórtices, formada por vectores de quiralidad, calculamos la vorticidad asociada con contornos cerrados en la red de plaquetas. Encontramos que la anisotropía es la clave para controlar la separación entre vórtices, mientras se mantiene estable la estructura topológica de la fase AF-SkX. Hemos confirmado este escenario por medio de las simulaciones de Monte Carlo a gran escala. Una característica más relevante en esta nueva fase topológica es que la red de pares de vórtices emerge en el estado fundamental del sistema, mientras que en el HTAF puro, los vórtices \mathbb{Z}_2 aparecen como estados térmicamente excitados [44]. Este estudio propone una herramienta para explorar las redes de vórtices: la manipulación de la anisotropía en la interacción DM. Esto abre la puerta a la exploración de nuevas propiedades topológicas de las texturas de espines. Esperamos que la anisotropía de la interacción DM pueda realizarse de forma experimental mediante tensiones, como se hace, por ejemplo, en el compuesto de FeGe [108]. Un objetivo difícil es la detección de las redes de vórtices \mathbb{Z}_2 , aunque se sugirió que el factor de estructura dinámico del campo de espines, que se puede medir por medio de experimentos de dispersión inelástica de neutrones, podría ser la clave para lograr este objetivo [177].

Con respecto a la posible realización del escenario discutido aquí, mencionamos que los compuestos CoO_2 y $\text{Ba}_3\text{IrTi}_2\text{O}_9$ [167] son ejemplos de sistemas antiferromagnéticos triangulares. Para el primer material, se propuso un modelo de Kitaev-Heisenberg que podría conducir a una teoría efectiva de baja energía similar a la de los helimagnetos quirales con un término de DM. Para el segundo material, se argumentó que una interacción DM podría existir y ser relevante en este sistema. Para ambos, la presencia de vórtices \mathbb{Z}_2 se predijo teóricamente [167, 173]. Otros ejemplos de antiferromagnetos triangulares, para los cuales se consideró un término DM en el modelo teórico, son los compuestos Cs_2CuBr_4 [178] y Cs_2CuCl_4 [179]. Sin embargo, no se predijo ninguna fase SkX ni vórtices \mathbb{Z}_2 . Finalmente, la anisotropía en el término DM podría ser inducida por tensiones en el sistema. Como ya mencionamos antes, en monocristales de FeGe (sistema ferromagnético), la deformación fue inducida mecánicamente (por medio de esfuerzos térmicos), lo que condujo a la anisotropía mencionada anteriormente en la interacción DM, que a su vez tiene la consecuencia de estabilizar skyrmions elípticos [108]. Otro ejemplo lo constituyen

los experimentos realizados en películas delgadas de Co (ferromagneto) depositadas sobre una película de W [180], la diferencia entre los parámetros de red de ambos materiales conduce a una estructura tensionada de la película Co que induce un acoplamiento DM anisotrópico en la interfaz W/Co. Esperamos entonces que la aplicación de esfuerzos de tensión a un sistema antiferromagnético pueda tener un efecto similar en la interacción DM.

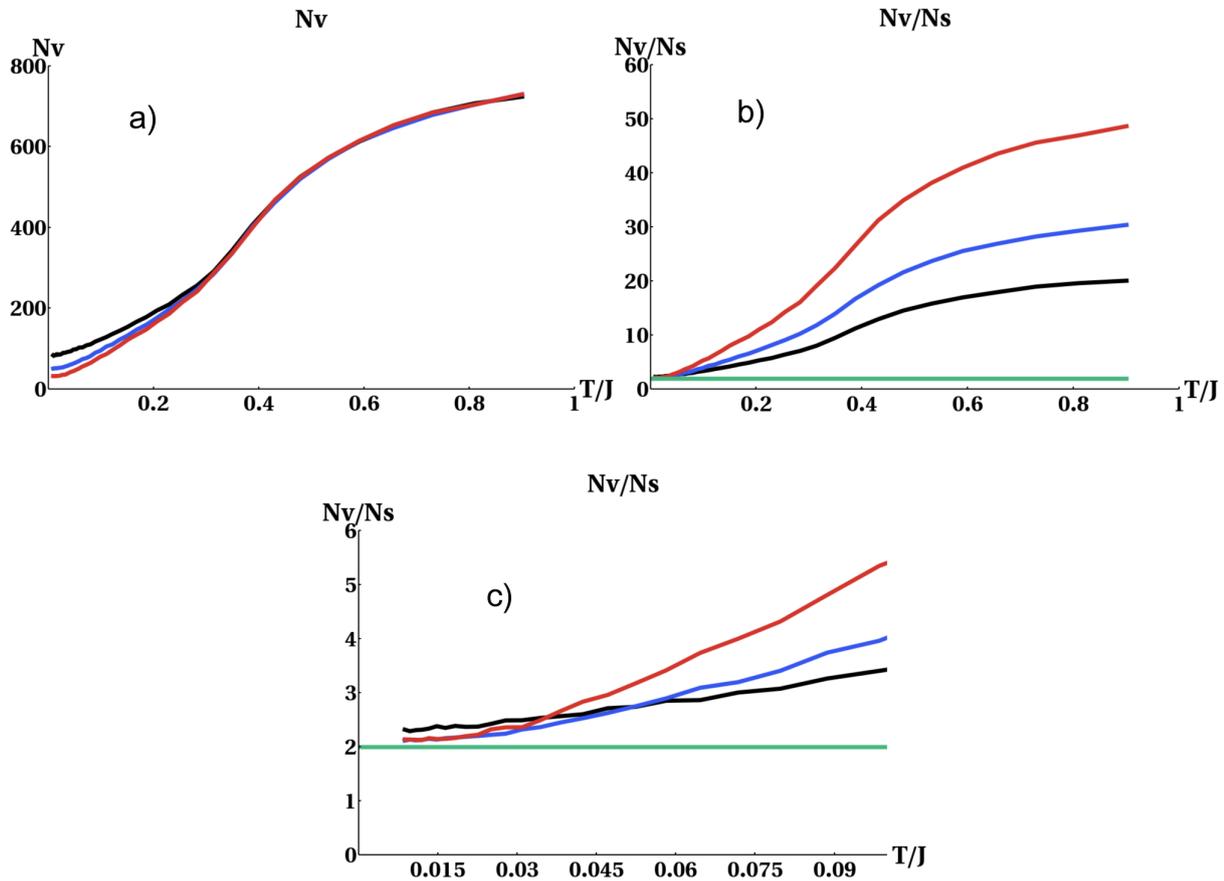


Figura 5.12: (a) Gráfico del número de vórtices N_v como función de la temperatura para $B/J = 2,7$ y diferentes valores de D_x, D_y : $D_y/J = 0,35, D_x/J = 0,27$ (rojo), $D_y/J = D_x/J = 0,35$ (negro) y $D_y/J = 0,27, D_x/J = 0,35$ (azul). (b) Número de vórtices dividido el número de skyrmiones N_s a baja temperatura. Las curvas roja, negra y azul, corresponden a los casos anteriores para los valores de D_x y D_y , y el número de skyrmiones en cada uno de estos casos es: $N_s = 15$ para $D_y > D_x$ (curva roja), $N_s = 36$ para $D_y = D_x$ (curva negra) y $N_s = 24$ para $D_y < D_x$ (curva azul). La recta horizontal verde representa la ecuación $N_v/N_s = 2$. (c) Ampliación del gráfico en (b) correspondiente a la región de temperaturas $0 \leq T/J \leq 0,1$. En todos los casos anteriores, N_v se obtuvo como un promedio sobre 100 configuraciones de espín del número de vórtices calculado en cada una de ellas.

Capítulo 6

Conclusiones

“Es una locura odiar a todas las rosas sólo porque una te pinchó. Renunciar a todos tus sueños sólo porque uno de ellos no se cumplió.”

El Principito, Saint-Exupéry.

A lo largo de esta tesis hemos estudiado la presencia de skyrmiones y redes de skyrmiones en sistemas magnéticos. Como hemos visto, esta es una textura magnética topológicamente no trivial, atributo que le confiere una gran estabilidad en los sistemas de espines incluso cuando diferentes perturbaciones pueden estar presentes.

En el desarrollo de nuestro trabajo estudiamos tanto sistemas ferromagnéticos como antiferromagnéticos, y en estos últimos analizamos el rol de la frustración en la estabilidad de las redes de skyrmiones. A partir de este punto, nuestra atención se desplazó hacia el estudio de vórtices \mathbb{Z}_2 . Este tipo de objetos generalmente se encuentran en redes antiferromagnéticas frustradas y aquí hemos demostrado el vínculo que existe entre redes de skyrmiones y redes de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 .

El hilo conductor que define la estructura de la tesis, y el orden de exposición de los temas anteriores, lo podemos resumir en la siguiente afirmación:

La deformación de una red de skyrmiones en un sistema antiferromagnético frustrado conduce a la aparición de una red de vórtices \mathbb{Z}_2 en dicho sistema.

Señalamos entonces a la anterior afirmación como la tesis central de nuestro trabajo.

A continuación describimos brevemente cuales han sido los resultados más importantes que hemos obtenido y planteamos algunos interrogantes y perspectivas a los cuales dirigir futuros trabajos.

6.0.1. Skyrmiones en sistemas ferromagnéticos

Hemos visto que en un sistema ferromagnético es posible encontrar skyrmiones. Los diferentes tipos de interacciones, como intercambio, interacción de Dzyaloshinskii-Moriya y acoplamiento con campos externos, determinan el diagrama de fases del sistema en el que un skyrmión puede surgir como un estado metaestable. Hemos introducido un método que proporciona un enfoque para el estudio sistemático de la estabilidad y la forma de los skyrmiones. Una característica importante del método reside en su rápida

convergencia. En la mayoría de los casos, una expansión en un pequeño número de modos es suficiente para capturar la física del problema, lo que permite un enfoque analítico. El método reproduce satisfactoriamente los resultados numéricos y experimentales que hemos analizado y provee una herramienta para el estudio de la manipulación de skyrmiones en sistemas magnéticos.

Como vimos, la aparición de una inestabilidad elíptica da cuenta de un proceso de estiramiento del skyrmión y esto es indicio de una transición de fase hacia el estado helicoidal. Nos planteamos entonces la siguiente pregunta: ¿es posible generalizar la identificación de una inestabilidad particular con un proceso de deformación del skyrmión que conduce a la estabilidad de una nueva fase?

Dado que el estado de equilibrio de los sistemas que hemos estudiado corresponde a una red de skyrmiones (en lugar de skyrmiones aislados) es importante disponer de un método para analizar su estabilidad. Esto podría realizarse siguiendo las líneas propuestas en el desarrollo de nuestro método, extendiéndolo al estudio de redes de skyrmiones.

Recientemente se ha observado que la curvatura de una superficie tiene efectos en la estabilidad y forma de los skyrmiones [181–183]. En este sentido podemos adaptar nuestro método para estudiar este tipo de efectos.

6.0.2. Skyrmiones en sistemas antiferromagnéticos

Con respecto al estudio de sistemas antiferromagnéticos, hemos construido una teoría efectiva a partir de la cual estudiamos la estabilidad de redes de skyrmiones en la red triangular. Esta teoría efectiva de baja energía predice la existencia de una fase cristalina (AF-SkX) y su estructura está caracterizada por la presencia de una red de skyrmiones en cada subred del sistema. La forma en la que estas redes se interpenetran y la porción del diagrama de fases en la que encontramos esta fase fueron determinadas mediante métodos variacionales y los resultados encontrados son consistentes con los obtenidos por simulaciones de Monte Carlo. Esto motiva el empleo del Hamiltoniano efectivo para futuros estudios. Por ejemplo se puede estudiar la inclusión de portadores de carga a través del acoplamiento de Hund con la textura magnética, y esto a su vez podría servir como un punto de partida para estudiar los fenómenos de transporte. En este sentido es importante notar que la gran estabilidad que presenta la fase AF-SkX para una amplia gama de campos magnéticos puede tener consecuencias interesantes en el contexto del efecto Hall anómalo.

Es sabido que la frustración juega un papel muy importante, y lo hemos visto en esta tesis, en la estabilidad de las redes de skyrmiones. Este conocimiento se tiene a partir del estudio de un conjunto de modelos particulares que presentan frustración. Podemos aplicar el método propuesto para estudiar la estabilidad de los skyrmiones a teorías efectivas para sistemas frustrados. Esto contribuiría a ampliar y generalizar el conocimiento que tenemos sobre la relación entre la frustración y la estabilidad de los skyrmiones.

6.0.3. Skyrmiones y vórtices \mathbb{Z}_2

Finalmente hemos estudiado la conexión entre la estructura topológica presente en la fase AF-SkX y la de la red de vórtices \mathbb{Z}_2 . Esta tarea la hemos realizado recurriendo a una combinación de técnicas, que incluye el estudio del problema mediante una teoría efectiva

de campo, la aproximación de Luttinger-Tisza y simulaciones numéricas de Monte-Carlo. Nuestro resultado más sorprendente es que en la fase AF-SkX, una pequeña anisotropía en la interacción DM induce la aparición de una red periódica de pares de vórtices \mathbb{Z}_2 que cubren todo el sistema magnético. Encontramos que la anisotropía es la clave para controlar la separación entre vórtices, mientras se mantiene estable la estructura topológica de la fase AF-SkX. Hemos confirmado este escenario por medio de las simulaciones de Monte Carlo a gran escala. Una característica más relevante en esta nueva fase topológica es que la red de pares de vórtices emerge en el estado fundamental del sistema, mientras que en el HTAF puro los vórtices \mathbb{Z}_2 aparecen como estados térmicamente excitados. Este estudio propone una herramienta para explorar las redes de vórtices: la manipulación de la anisotropía del DM.

Para continuar con esta línea nos proponemos indagar qué otros mecanismos pueden conducir a la aparición de una red de vórtices \mathbb{Z}_2 . Hemos visto que las deformaciones de la red AF-SkX inducen pares de vórtices, sin embargo cabe la posibilidad de otras alteraciones de su estructura den origen a un fenómeno similar al que hemos observado.

Es importante determinar qué magnitudes físicas pueden manifestar la presencia de los vórtices. En este sentido nos proponemos profundizar en el estudio de las propiedades del sistema que hemos considerado. Una característica importante del mismo es que la estructura de pares de vórtices puede ser controlada, incluso a $T = 0$, mediante la anisotropía en la interacción DM. Esto provee un escenario interesante en el cual verificar los resultados de un trabajo reciente en el que se ha sugerido la posibilidad de identificar la presencia de los vórtices \mathbb{Z}_2 mediante el estudio del factor de estructura dinámico [177].

Si bien la estructura que hemos observado para los vórtices \mathbb{Z}_2 corresponde a una red cristalina, es importante conocer las propiedades de los pares de vórtices individuales. De esta manera sería posible reconocer si el efecto de la anisotropía en la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya se traduce en una interacción repulsiva entre los vórtices. Lo que proponemos aquí es deducir la estructura de los pares de vórtices aislados a partir de una teoría formulada en términos de matrices de $SO(3)$.

Apéndice A

Expresiones y aproximaciones utilizadas en el estudio de la estabilidad de skyrmiones

A.1. Vector L_n y matriz M_{nm}

Dado que la función $R(\phi)$ representa un cambio de escala de las coordenadas, las integrales radiales se pueden calcular fácilmente mediante la sustitución $u = r/R(\phi)$. Estas integrales son constantes independientes de los parámetros del modelo (excepto $\tilde{\Lambda}_3$ que depende de θ_B , el ángulo de inclinación del campo externo) y aparecen en todos nuestros cálculos. A continuación enumeramos el conjunto de constantes que aparecen a lo largo de todo el trabajo:

$$\begin{aligned}\Lambda_1 &= \int_0^1 u(f'(u))^2 du = \frac{\pi^2}{2}, \\ \Lambda_2 &= \int_0^1 \frac{\sin^2[f(u)]}{u} du = \\ &= \frac{\gamma - \text{CosIntegral}[2\pi] + \log[2\pi]}{2}, \\ \tilde{\Lambda}_3 &= \int_0^1 u \cos(\theta_B) \cos[f(u)] du = \\ &= \frac{2 \cos(\theta_B)}{\pi^2} - \frac{1}{2}, \\ \Lambda_4 &= \int_0^1 u f'(u) du = -\frac{\pi}{2}, \\ \tilde{\Lambda}_5 &= \frac{\sin(\theta_B)}{\pi},\end{aligned}$$

donde γ es la constante de Euler ($\gamma \approx 0,577216$). Para $\theta_B = 0$ tenemos $\tilde{\Lambda}_3 = \Lambda_3$ y $\tilde{\Lambda}_5 = 0$.

La energía, en un modelo específico, se expresa como una suma de la contribución de cada interacción. Por lo tanto, para el modelo con interacción DM anisotrópica en un

campo magnético transversal tenemos:

$$E_0^A = E_0^J + E_0^{DA} + E_0^Z, \quad (\text{A.1})$$

$$L_n^A = L_n^J + L_n^{DA} + L_n^Z, \quad (\text{A.2})$$

$$M_{nm}^A = M_{nm}^J + M_{nm}^{DA} + M_{nm}^Z. \quad (\text{A.3})$$

Para el modelo isotrópico en un campo magnético inclinado tenemos:

$$E_0^T = E_0^J + E_0^{DI} + E_0^{ZT}, \quad (\text{A.4})$$

$$L_n^T = L_n^J + L_n^{DI} + L_n^{ZT}, \quad (\text{A.5})$$

$$M_{nm}^T = M_{nm}^J + M_{nm}^{DI} + M_{nm}^{ZT}. \quad (\text{A.6})$$

Con la adición del término magnetoelectrico al modelo isotrópico (en campo magnético transversal) tenemos:

$$E_0^{ME} = E_0^J + E_0^{DI} + E_0^Z + E_0^E, \quad (\text{A.7})$$

$$L_n^{ME} = L_n^J + L_n^{DI} + L_n^Z + L_n^E, \quad (\text{A.8})$$

$$M_{nm}^{ME} = M_{nm}^J + M_{nm}^{DI} + M_{nm}^Z + M_{nm}^E. \quad (\text{A.9})$$

Aquí escribimos las expresiones respectivas para E_0 , L_n y M_{nm} para cada término de interacción. Para el término de intercambio:

$$E_0^J = J\pi(\Lambda_1 + \Lambda_2), \quad (\text{A.10})$$

$$L_n^J = 0,$$

$$M_{nm}^J = \frac{J\pi}{2R_0^2}(\Lambda_1 n^2 + \Lambda_2 n^4)\delta_{nm}.$$

Para el modelo con DM anisotrópico (el caso isotrópico es el caso particular de este en el que $D_x = D_y = D$):

$$E_0^{DA} = -\Lambda_4 D^+ \pi R_0 \sin(\chi_0), \quad (\text{A.11})$$

$$L_n^{DA} = \Lambda_4 D^- \pi \frac{3}{2} \sin(\beta_2 - \chi_0) \delta_{n2},$$

$$M_{nm}^{DA} = \Lambda_4 D^- \pi \frac{3}{8R_0} \sin(\chi_0 - 2\beta_1) \delta_{n1} \delta_{m1} - \Lambda_4 D^+ \pi \frac{\pi}{4R_0} \sin(\chi_0) n^2 \delta_{nm} - \frac{3\Lambda_4 D^- \pi}{8R_0} [n(n+2) \sin(\beta_n - \beta_{n+2} + \chi_0) \delta_{mn+2} + m(m+2) \sin(\beta_m - \beta_{m+2} + \chi_0) \delta_{nm+2}].$$

El término Zeeman para un campo magnético inclinado:

$$\begin{aligned}
E_0^{ZT} &= -B\tilde{\Lambda}_3 2\pi R_0^2, \\
L_n^{ZT} &= -B\tilde{\Lambda}_5 \pi R_0 \cos(\phi_B + \beta_1 - \chi_0) \delta_{1n}, \\
M_{nm}^{ZT} &= -B\tilde{\Lambda}_3 \pi \delta_{nm} - \\
&\quad - B\tilde{\Lambda}_5 \frac{\pi}{4} \left[\left(\frac{3}{2} + n(n+1) \right) \cos(\beta_{n+1} - \beta_n + \phi_B - \chi_0) \delta_{mn+1} \right] - \\
&\quad - B\tilde{\Lambda}_5 \frac{\pi}{4} \left[\left(\frac{3}{2} + m(m+1) \right) \cos(\beta_{m+1} - \beta_m + \phi_B - \chi_0) \delta_{nm+1} \right].
\end{aligned} \tag{A.12}$$

La configuración del campo transversal (E_0^Z , L_n^Z y M_{nm}^Z) se obtiene al fijar $\theta_B = 0$. Finalmente el término magnetoeléctrico contribuye con:

$$\begin{aligned}
E_0^E &= 0, \\
L_n^E &= E \sin(\gamma) \frac{R_0}{4} \sin(\beta_1 - \chi_0 - \alpha), \\
M_{nm}^E &= -E \frac{3\pi}{32} \cos(\gamma) \sin(2\beta_1 - 2\chi_0) \delta_{n1} \delta_{m1} - \\
&\quad - \frac{E \sin(\gamma)}{8} \left[\left(\frac{1-2n}{4} \right) \sin(\beta_n - \beta_{n+1} + \chi_0 + \alpha) \delta_{mn+1} \right] - \\
&\quad - \frac{E \sin(\gamma)}{8} \left[\left(\frac{1-2m}{4} \right) \sin(\beta_m - \beta_{m+1} + \chi_0 + \alpha) \delta_{nm+1} \right] + \\
&\quad + \frac{E\pi}{16} \cos(\gamma) [\sin(2\chi_0 + \beta_n - \beta_{n+2})(1 + 2n(n+2)) \delta_{mn+2}] + \\
&\quad + \frac{E\pi}{16} \cos(\gamma) [\sin(2\chi_0 + \beta_m - \beta_{m+2})(1 + 2m(m+2)) \delta_{nm+2}].
\end{aligned} \tag{A.13}$$

En cada caso, el radio de equilibrio (R_0) y la helicidad (χ_0), así como los parámetros β_n , deben calcularse para el modelo correspondiente como se explica en el texto principal de la tesis.

A.2. Relevancia de la discontinuidad

Como mencionamos al comienzo de la Sección 3.1.3.2, por medio del Ansatz que hemos considerado para estudiar este problema introducimos una discontinuidad en el campo de espines para $r = R$. Para estimar la contribución de esta discontinuidad a la energía, suponemos que el campo de espines varía desde el contorno del skyrmión (en $r = R$) y que la variación se produce en una longitud del orden del parámetro de red a , por lo tanto el estado polarizado en la dirección del campo es alcanzado en $r = R + a$. Esta variación tiene lugar en una corona de radio interno R y radio externo $R + a$. Expresamos el campo de espín en esta corona circular como en la Ec. 3.2 donde las funciones Θ y Φ están dadas

por:

$$\Theta(r) = \frac{\theta_B}{a}(r - R), \quad R \leq r \leq R + a, \quad (\text{A.14})$$

$$\Phi(r) = \frac{\phi_B}{a}(r - R), \quad R \leq r \leq R + a. \quad (\text{A.15})$$

Evalúamos la energía (que llamaremos E_D) a través de la aproximación anterior y le restamos la energía de la corona con su espín alineado con el campo magnético (E_{FP}). Ya que estamos interesados en los ángulos θ_B pequeños, expandimos el resultado anterior hasta el tercer orden en θ_B y obtenemos:

$$E_D - E_{FP} \approx F_B \frac{\theta_B^2}{12\pi} + \mathcal{O}(\theta_B^4),$$

donde

$$\begin{aligned} F_B &= & (\text{A.16}) \\ &= B \left[9a^2 + 16aR_0 - 48 \frac{a^2}{\phi_B^2} - 24 \frac{aR_0}{\phi_B^2} + 24 \frac{aR_0 \cos[\phi_B]}{\phi_B^2} + 48 \frac{a^2 \sin[\phi_B]}{\phi_B^3} \right] + \\ &+ J \left[6 + 12 \frac{R_0}{a} + 3\phi_B^2 + 4 \frac{R_0 \phi_B^2}{a} \right]. \end{aligned}$$

Podemos ver que esta diferencia es de orden θ_B^2 , como se mencionó en la Sección 3.1.3.2.

Apéndice B

Método de Nelder-Mead

El método de Nelder-Mead se emplea para encontrar mínimos locales de una función de varias variables [121, 122]. Este método se basa en la construcción sucesiva de simplexes. Para dos variables, un simplex es un triángulo, y el método consiste en la comparación de los valores de la función en cada uno de los vértices del triángulo. Definimos el vértice “w” (de “worst”), donde $f(x, y)$ toma el valor máximo. El método consiste en descartar y reemplazar este vértice con uno nuevo. Luego de esto, un nuevo triángulo se construye y el procedimiento se repite sucesivamente. Este proceso genera una sucesión de triángulos (que pueden tener diferentes formas), para los cuales los valores de la función en cada vértice se hacen menores en cada paso iterativo. El tamaño de los triángulos se reduce gradualmente y finalmente se obtienen las coordenadas del mínimo de la función.

El algoritmo se establece recurriendo a la noción de *simplex* (una generalización del triángulo a dimensión N) y permite encontrar mínimos locales de funciones de N variables. Se trata de un algoritmo efectivo y compacto desde el punto de vista computacional.

Describiremos los pasos generales en los que se desarrolla el algoritmo.

Triángulo Inicial BGW

Sea $f(x, y)$ la función que nos interesa minimizar. Para comenzar, consideramos tres vértices de un triángulo: $\mathbf{V}_k = (x_k, y_k)$, $k = 1, 2, 3$. Evaluamos entonces la función $f(x, y)$ en cada uno de los tres puntos anteriores: $z_k = f(x_k, y_k)$ para $k = 1, 2, 3$. Reordenamos entonces los índices de tal forma que $z_1 \leq z_2 \leq z_3$. Ahora introducimos la siguiente notación

$$\mathbf{B} = (x_1, y_1), \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{G} = (x_2, y_2), \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{W} = (x_3, y_3), \quad (\text{B.3})$$

donde \mathbf{B} representa el mejor vértice (“best”), \mathbf{G} es siguiente mejor vértice (“good”), y \mathbf{W} es el peor vértice (“worst”).

Punto medio del “lado bueno”

El proceso de construcción usa el punto intermedio del segmento de línea que conecta los puntos \mathbf{B} y \mathbf{G} . Se obtiene promediando las coordenadas:

$$\mathbf{M} = \frac{\mathbf{B} + \mathbf{G}}{2} = \left(\frac{x_1 + x_2}{2}, \frac{y_1 + y_2}{2} \right). \quad (\text{B.4})$$

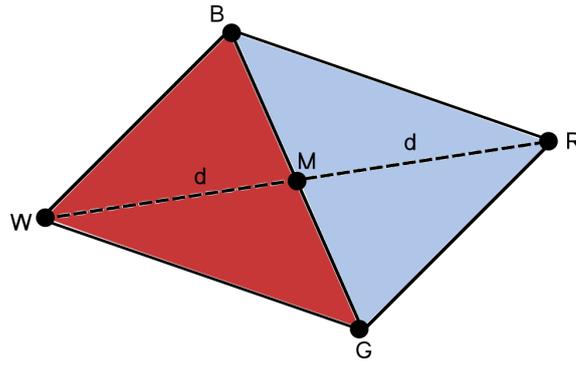


Figura B.1: El triángulo $\triangle BGW$, el punto medio M y el punto reflejado R para el método de Nelder-Mead.

Reflexión utilizando el punto R

La función decrece a medida que nos movemos a lo largo del lado del triángulo que conecta los puntos W y B , y también decrece cuando no movemos a lo largo del lado que va de W a G . Por lo tanto es factible que la función $f(x, y)$ tome valores aún menores en puntos que estén alejados de W en el lado opuesto de la línea entre B y G . Elegimos un punto de testeo R que se obtiene “reflejando” el triángulo respecto al lado BG . Para determinar R , primero encontramos el punto medio M del lado BG . Luego trazamos el segmento desde W a M y a su longitud la llamamos d . Extendemos este último segmento una distancia d a través de M para obtener el punto R (Fig. B.1). La ecuación para R es

$$\mathbf{R} = \mathbf{M} + (\mathbf{M} - \mathbf{W}) = 2\mathbf{M} - \mathbf{W}. \quad (\text{B.5})$$

Extensión utilizando el punto E

Si el valor de la función en el punto R es menor que en el punto W , entonces nos hemos movido en la dirección correcta hacia el mínimo. Es posible que el mínimo se encuentre un poco más allá del punto R . Entonces extendemos el segmento de línea a través de M y R al punto E . Esto forma un triángulo expandido BGE . El punto E se obtiene moviéndonos una distancia adicional d a lo largo de la línea que une M y R (Fig. B.2). Si el valor de la función en el punto E es menor que el valor de la función en el punto R , entonces hemos encontrado un mejor vértice que R . La expresión para E es

$$\mathbf{E} = \mathbf{R} + (\mathbf{R} - \mathbf{M}) = 2\mathbf{R} - \mathbf{M}. \quad (\text{B.6})$$

Contracción utilizando el punto C

Si los valores de la función en los puntos R y W son iguales, entonces debemos evaluar otro punto. Podría suceder que la función sea menor en el punto M , pero no podemos reemplazar W con M porque debemos tener un triángulo. Consideremos entonces dos puntos medio C_1 y C_2 de los segmentos de línea \overline{WM} y \overline{MR} , respectivamente (Fig. B.3). Al punto en el que la función toma el menor valor lo llamamos C , y el nuevo triángulo es BGC . La selección entre C_1 y C_2 puede parecer inapropiada para el caso bidimensional, sin embargo es importante en el caso de mayor dimensión.

Reducción hacia el punto B

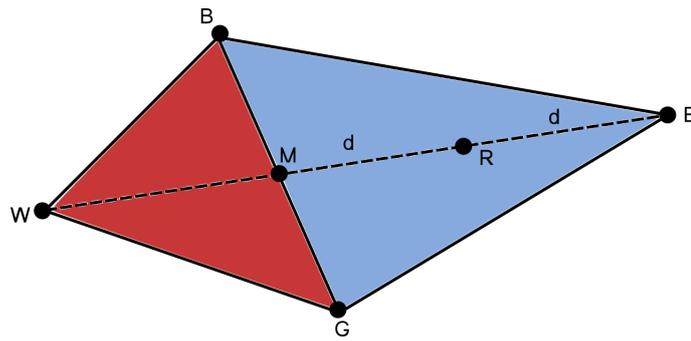


Figura B.2: El triángulo $\triangle BGW$, el punto medio \mathbf{R} y el punto extendido \mathbf{E} .

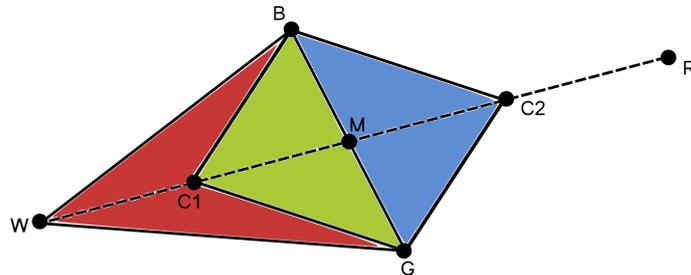


Figura B.3: Los puntos de contracción \mathbf{C}_1 o \mathbf{C}_2 para el método de Nelder-Mead.

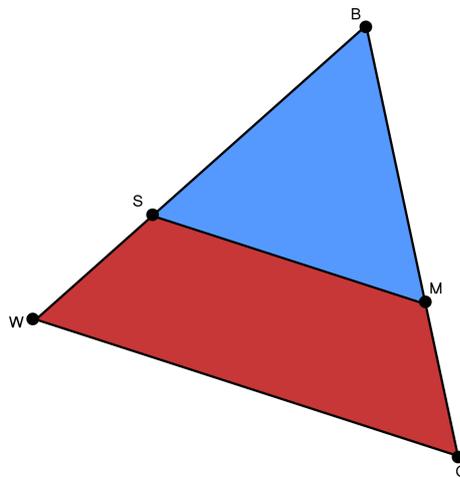


Figura B.4: Contracción del triángulo hacia \mathbf{B} .

Si el valor de la función en el punto \mathbf{C} no es menor que el valor en el punto \mathbf{W} , los puntos \mathbf{G} y \mathbf{W} deben ser contraídos hacia \mathbf{B} (Fig. B.4). El punto \mathbf{G} es reemplazado por el punto \mathbf{M} , y \mathbf{W} es reemplazado por el punto \mathbf{S} , el punto medio del segmento que conecta \mathbf{B} con \mathbf{W} .

Apéndice C

Aproximación de Luttinger-Tisza

El método de Luttinger-Tisza (LT) es una técnica analítica que permite determinar al vector de ordenamiento de un Hamiltoniano a $T = 0$ [170, 174]. Nuestro objetivo es encontrar dicho estado para un conjunto de N espines \mathbf{S}_i , que minimizará la energía total, sujetos a la condición de que todos los espines tienen longitud fija

$$|\mathbf{S}_i| = S. \quad (\text{C.1})$$

Para ilustrar como funciona el método de LT tomemos como ejemplo un sistema de espines con interacciones de Heisenberg. Consideremos espines $\mathbf{S}_{i,\alpha}$, y $\mathbf{S}_{j,\beta}$, ubicados en $\mathbf{r}_{i,\alpha}$ y $\mathbf{r}_{j,\beta}$, respectivamente con α y β indicando la subred a la que eventualmente podría pertenecer el espín y consideremos en forma general M de dichas subredes. Tomemos a la interacción entre dichos espines tal que la misma dependa de su posición relativa, es decir

$$J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta})\mathbf{S}_{i,\alpha} \cdot \mathbf{S}_{j,\beta}, \quad (\text{C.2})$$

donde $\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta} = \mathbf{r}_{i,\alpha} - \mathbf{r}_{j,\beta}$ denota la separación entre el i -ésimo espín en la subred α y el j -ésimo espín en la subred β ; asumiremos, además, que $J(-\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) = J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta})$. Hagamos ahora un desarrollo de Fourier para los espines en el espacio recíproco de manera de escribirlos como

$$\mathbf{S}_{l,\gamma} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k},\gamma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{l,\gamma}}, \quad (\text{C.3})$$

donde N/M denota el número de espines en la subred particular γ . Imponiendo que $\mathbf{S}_{l,\gamma}$ sea real, es fácil ver que cumple la condición $\mathbf{S}_{-\mathbf{k},\gamma} = \mathbf{S}_{\mathbf{k},\gamma}^*$ donde $\mathbf{S}_{\mathbf{k},\gamma}^*$ es el complejo conjugado de $\mathbf{S}_{\mathbf{k},\gamma}$. De esta forma, el Hamiltoniano del sistema dado por

$$H = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) \mathbf{S}_{i,\alpha} \cdot \mathbf{S}_{j,\beta}, \quad (\text{C.4})$$

puede expresarse de la siguiente forma

$$H = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k},\alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{i,\alpha}} \right) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{S}_{\mathbf{k}',\beta} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_{j,\beta}} \right). \quad (\text{C.5})$$

Las sumas sobre el Hamiltoniano están sujetas a la condición que $i \neq j$ si $\alpha = \beta$, de

manera que los espines no interactúen consigo mismo. Reescribiendo $\mathbf{r}_{j,\beta} = \mathbf{r}_{i,\alpha} - \mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}$ y reacomodando las sumas obtenemos

$$H = \frac{1}{n} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) \mathbf{S}_{\mathbf{k},\alpha} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_{i,\alpha}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}',\beta} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}}. \quad (\text{C.6})$$

Dado que hicimos el cambio $\mathbf{r}_{j,\beta} = \mathbf{r}_{i,\alpha} - \mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}$, la suma sobre j equivale ahora a la suma sobre las separaciones entre todos los espines; esto significa que podemos efectuar la suma sobre i dejando todas las otras variables constantes. Esta sumatoria solamente afecta al término que contiene la exponencial de $(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$ y su resultado es

$$\sum_i e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_{i,\alpha}} = n\delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad (\text{C.7})$$

donde $\delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ es la delta de Kronecker. De esta manera, usando este resultado en Ec. C.6 y haciendo la suma sobre \mathbf{k}' obtenemos

$$H = \sum_{\alpha,\beta} \sum_i \sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) \mathbf{S}_{\mathbf{k},\alpha} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k},\beta} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}}. \quad (\text{C.8})$$

Si ahora definimos a la cantidad $J_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ (la transformada de Fourier de $J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta})$) como

$$J_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_j J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}}, \quad (\text{C.9})$$

entonces finalmente el Hamiltoniano nos queda expresado en el espacio recíproco de la siguiente manera

$$H = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\mathbf{k}} J_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k},\alpha} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k},\beta}. \quad (\text{C.10})$$

El sumando de la sumatoria sobre \mathbf{k} en la expresión anterior no es otra cosa que la forma cuadrática sobre una matriz cuyos elementos son $J_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$. Llamaremos a esta matriz $\Lambda(\mathbf{k})$ y a partir de esta podremos escribir al Hamiltoniano como una forma cuadrática

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \Lambda(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{-\mathbf{k}}, \quad (\text{C.11})$$

siendo $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}$ el vector cuyos elementos están dados por

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}} = (S_{1,x}, S_{2,x}, \dots, S_{M,x}, S_{1,y}, S_{2,y}, \dots, S_{M,y}, S_{1,z}, S_{2,z}, \dots, S_{M,z}), \quad (\text{C.12})$$

donde $S_{\sigma,\gamma}$ es la componente $\gamma = x, y, z$ del espín de la subred $\sigma = 1, 2, \dots, M$.

Recordemos que lo que estamos buscando es el mínimo de la Ec. C.4 o, lo que es lo mismo, de la Ec. C.10 sujeto a la condición $|\mathbf{S}_{l,\alpha}| = S$ para todo l . Este problema no se puede resolver de manera exacta. Podemos, entonces, como primera aproximación relajarla imponiendo la condición

$$\sum_{l,\alpha} \mathbf{S}_{l,\alpha}^2 = NS^2. \quad (\text{C.13})$$

Si ahora la escribimos en el espacio recíproco obtenemos

$$\sum_{\mathbf{k},\alpha} \mathbf{S}_{\mathbf{k},\alpha} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k},\alpha} = NS^2. \quad (\text{C.14})$$

Tenemos entonces un problema de optimización con una restricción dada por la Ec. C.13, para resolverlo utilizamos el método de multiplicadores de Lagrange definiendo

$$F = H - \lambda \left(\sum_{i,\alpha} \mathbf{S}_{i,\alpha}^2 - NS^2 \right), \quad (\text{C.15})$$

donde λ es el multiplicador de Lagrange. Escribiendo esta última ecuación en el espacio de momentos el problema de optimización nos queda (haciendo uso del vínculo en la Ec. C.14)

$$F = H - \lambda \left(\sum_{\mathbf{k},\alpha} \mathbf{S}_{\mathbf{k},\alpha} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k},\alpha} - NS^2 \right), \quad (\text{C.16})$$

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{S}_{-\mathbf{k},\alpha}} = 0. \quad (\text{C.17})$$

Reemplazando ahora a H por el resultado encontrado en la Ec. C.10, la Ec. C.16 y tomando la derivada en Ec. C.17 arribamos a la ecuación

$$\sum_{\alpha} J_{\alpha,\beta}(-\mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k},\alpha} = \lambda \mathbf{S}_{\mathbf{k},\alpha}, \quad (\text{C.18})$$

donde se utilizó el hecho de que $J_{\alpha,\beta}(-\mathbf{k}) = J_{\alpha,\beta}(\mathbf{k})$. Esta ecuación representa una ecuación de autovalores con $J_{\alpha,\beta}(\mathbf{k})$ los elementos de una matriz, que hemos llamado $\Lambda(\mathbf{k})$. A partir de esta ecuación es fácil ver que, entonces, para hallar el mínimo de energía, es necesario encontrar el menor autovalor de la Ec. C.18. Esto se logra resolviendo el polinomio característico que sale de calcular

$$\det(\Lambda(-\mathbf{k}) - \lambda \mathbb{1}) = 0, \quad (\text{C.19})$$

donde $\mathbb{1}$ denota la matriz identidad. Los vectores de onda (pueden existir más de uno) asociados a la mínima autoenergía, λ_{min} , cumplirán

$$\Lambda(-\mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}} = \lambda_{min} \mathbf{S}_{\mathbf{k}}, \quad (\text{C.20})$$

y serán los únicos vectores de onda que contribuirán a la energía del estado fundamental; por lo tanto, la energía dada por el Hamiltoniano C.11 estará dada por

$$E = \lambda_{min} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}}, \quad (\text{C.21})$$

y utilizando la condición C.14 obtenemos finalmente que

$$\epsilon = \lambda_{min} S^2, \quad (\text{C.22})$$

con $\epsilon = E/N$ la energía por espín del estado fundamental.

Este método permite determinar el estado fundamental en redes de *Bravais* en donde se satisface la condición $\mathbf{S}^2 = S^2$, llamada condición fuerte, trivialmente. En una red que no es de *Bravais*¹, en cambio, puede ocurrir que la solución encontrada no satisfaga la condición anterior. No obstante, incluso en estos casos, el método nos provee un marco para construir estados fundamentales aproximados. El punto clave del procedimiento está en minimizar la energía de un sistema de N espines bajo la condición

$$\sum_i |\mathbf{S}_i|^2 = NS^2, \quad (\text{C.23})$$

en oposición a la condición $\mathbf{S}^2 = S^2$ establecida por ser espines de Heisenberg clásicos. A la condición C.23 se la llama condición débil. Si es posible encontrar una solución que además cumpla con la condición fuerte entonces habremos encontrado una solución exacta del problema.

¹Una red bidimensional de Bravais se define como el conjunto de puntos cuyos vectores de posición \mathbf{R} son de la forma:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2,$$

donde \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 son dos vectores no colineales, y n_1 y n_2 son número enteros. Un ejemplo de red que no es de Bravais es la red “honeycomb”, y se trata de una red de Bravais con base [64].

Apéndice D

Transición de Kosterlitz-Thouless

El Hamiltoniano del modelo XY está dado por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j), \quad (\text{D.1})$$

donde la orientación de los espines (planares) es representada por los ángulos ϕ_i y la suma se realiza sobre los primeros vecinos en una red cuadrada. Consideraremos el caso ferromagnético, por lo tanto $J > 0$.

De acuerdo al *teorema de Mermin-Wagner* [184] este modelo en el espacio bidimensional no exhibe una magnetización espontánea (orden de largo alcance) a temperaturas finitas y consecuentemente no presenta una transición de fase ordinaria (del tipo de Landau). Sin embargo, se sabe que este sistema presenta una transición de fase especial que carece de orden de largo alcance. En la fase de baja temperatura no se identifica un orden de largo alcance, pero tiene comportamientos, en cuanto a las propiedades de correlación, que son claramente diferentes de la fase paramagnética de alta temperatura. Mientras que la función de correlación decae exponencialmente en la fase paramagnética, en la fase de baja temperatura decae suavemente siguiendo una ley de potencias (excepto a $T = 0$ donde existe orden de largo alcance). Esta correlación tipo ley de potencias es una característica de lo que ocurre en un punto crítico. Una diferencia importante con un punto crítico usual es que esta ley de potencias se extiende sobre un rango de temperaturas finito. A los sistemas con un orden que decae de esta forma se dice que tiene orden de cuasi-largo alcance (“quasi-long-range order”, QLRO). Esta transición especial desde una fase que exhibe QLRO a una fase desordenada es conocida como *transición de Kosterlitz-Thouless (KT)*, y la fase crítica es conocida como *fase de Kosterlitz-Thouless* [42, 43]¹.

Si aproximamos $\cos(\phi_i - \phi_j) \approx 1 - \frac{1}{2}(\phi_i - \phi_j)^2$ y tomamos el límite continuo ($\phi_i - \phi_j \approx \mathbf{r}_{i,j} \cdot \nabla \phi$, con $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, donde \mathbf{r}_i es la posición del sitio “i”), el Hamiltoniano en la Ec. D.1 queda:

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \int (\nabla \phi)^2 d\mathbf{r}, \quad (\text{D.2})$$

donde hemos descartado términos constantes.

¹Una idea similar fue propuesta por V. L. Berezinskii en Refs. [185, 186].

De modo que si se usa la aproximación de ondas de espines para el cálculo de las funciones de correlación, que es válida a bajas temperaturas, encontramos que el modelo es crítico y no presenta transiciones de fases. Sin embargo, a temperaturas suficientemente elevadas, esperamos que el modelo XY se encuentra en la fase paramagnética en la que los ángulos relativos entre los momentos magnéticos decaigan exponencialmente. A medida que la temperatura crece desde el límite de temperaturas bajas, sucede que las variables ϕ_i tienen cambios más drásticos que los expresados en la aproximación de ondas de espines. La ecuación de Laplace $\nabla^2\phi = 0^2$ admite, además de la configuración uniforme $\phi = \text{const.}$, soluciones no-uniformes y singulares. Las soluciones de vórtices topológicos son estados inhomogéneos que no pueden ser descritos por funciones que varían suavemente (como son el caso de las ondas de espines). En particular, las configuraciones de vórtices, no tenidas en cuenta en la aproximación de ondas de espines, gradualmente afectan al estado del sistema, hasta eventualmente destruir el orden de cuasi-largo alcance.

Esta transición ocurre de tal modo que en la fase de baja temperatura existen pares de vórtices (un par está formado por un vórtice y un antivórtice) y su número crece al aumentar la temperatura del sistema. Al alcanzar una temperatura crítica $T_c = T_{KT} = \pi J/2$ estos pares de vórtices se rompen dando lugar a una fase de vórtices libres. Este es el proceso con el cual se asocia la transición de Kosterlitz-Thouless.

²Esta ecuación se deduce a partir del Hamiltoniano en Ec. D.2 si buscamos las configuraciones de mínima energía. En efecto encontramos que:

$$\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\phi} = 0 \Rightarrow \nabla^2\phi = 0. \quad (\text{D.3})$$

Bibliografía

- [1] THR Skyrme. A new model for nuclear matter. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 226(1167):521–530, 1954.
- [2] Gerald Edward Brown and Mannque Rho. *The multifaceted skyrmion*. World Scientific, 2010.
- [3] T. H. R. Skyrme. A non-linear field theory. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 260(1300):127–138, 1961.
- [4] Tony Hilton Royle Skyrme. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, 31:556–569, 1962.
- [5] NS Manton. Geometry of skyrmions. *Communications in Mathematical Physics*, 111(3):469–478, 1987.
- [6] AA Belavin and AM Polyakov. Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets. *JETP lett*, 22(10):245–248, 1975.
- [7] AN Bogdanov and DA Yablonskii. Thermodynamically stable “vortices” in magnetically ordered crystals. the mixed state of magnets. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 95:178, 1989.
- [8] A Bogdanov and A Hubert. The properties of isolated magnetic vortices. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 186:527, 1994.
- [9] A Bogdanov and A Hubert. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 138(3):255–269, 1994.
- [10] UK Rößler, AN Bogdanov, and C Pfleiderer. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. *Nature*, 442(7104):797–801, 2006.
- [11] Su Do Yi, Shigeki Onoda, Naoto Nagaosa, and Jung Hoon Han. Skyrmions and anomalous hall effect in a dzyaloshinskii-moriya spiral magnet. *Physical Review B*, 80(5):054416, 2009.
- [12] S Mühlbauer, B Binz, F Jonietz, C Pfleiderer, A Rosch, A Neubauer, R Georgii, and P Böni. Skyrmion lattice in a chiral magnet. *Science*, 323(5916):915–919, 2009.
- [13] Y Ishikawa, K Tajima, D Bloch, and M Roth. Helical spin structure in manganese silicide mnsi. *Solid State Communications*, 19(6):525–528, 1976.

- [14] Yoshikazu Ishikawa and Masatoshi Arai. Magnetic phase diagram of mnsi near critical temperature studied by neutron small angle scattering. *Journal of the Physical Society of Japan*, 53(8):2726–2733, 1984.
- [15] Ulrich K Röbner, Andrei A Leonov, and Alexei N Bogdanov. Skymionic textures in chiral magnets. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 200, page 022029. IOP Publishing, 2010.
- [16] Naoto Nagaosa and Yoshinori Tokura. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions. *Nature nanotechnology*, 8(12):899, 2013.
- [17] Giovanni Finocchio, Felix Büttner, Riccardo Tomasello, Mario Carpentieri, and Mathias Kläui. Magnetic skyrmions: from fundamental to applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 49(42):423001, 2016.
- [18] Albert Fert, Nicolas Reyren, and Vincent Cros. Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications. *Nature Reviews Materials*, 2(7):17031, 2017.
- [19] Karin Everschor-Sitte, Jan Masell, Robert M Reeve, and Mathias Kläui. Perspective: Magnetic skyrmions—overview of recent progress in an active research field. *Journal of Applied Physics*, 124(24):240901, 2018.
- [20] XZ Yu, Yoshinori Onose, Naoya Kanazawa, JH Park, JH Han, Yoshio Matsui, Naoto Nagaosa, and Yoshinori Tokura. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. *Nature*, 465(7300):901, 2010.
- [21] AB Butenko, AA Leonov, UK Röbner, and AN Bogdanov. Stabilization of skyrmion textures by uniaxial distortions in noncentrosymmetric cubic helimagnets. *Physical Review B*, 82(5):052403, 2010.
- [22] J Beille, J Voiron, and M Roth. Long period helimagnetism in the cubic b20 fe x co 1- x si and co x mn 1- x si alloys. *Solid state communications*, 47(5):399–402, 1983.
- [23] SV Grigoriev, VA Dyadkin, D Menzel, J Schoenes, Yu O Chetverikov, AI Okorokov, H Eckerlebe, and SV Maleyev. Magnetic structure of fe 1- x co x si in a magnetic field studied via small-angle polarized neutron diffraction. *Physical Review B*, 76(22):224424, 2007.
- [24] SV Grigoriev, D Chernyshov, VA Dyadkin, V Dmitriev, SV Maleyev, EV Moskvina, D Menzel, J Schoenes, and H Eckerlebe. Crystal handedness and spin helix chirality in fe 1- x co x si. *Physical Review Letters*, 102(3):037204, 2009.
- [25] Y Onose, N Takeshita, C Terakura, H Takagi, and Y Tokura. Doping dependence of transport properties in fe 1- x co x si. *Physical Review B*, 72(22):224431, 2005.
- [26] B Lebech, J Bernhard, and T Freltoft. Magnetic structures of cubic fege studied by small-angle neutron scattering. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1(35):6105, 1989.

- [27] M Uchida, N Nagaosa, JP He, Y Kaneko, S Iguchi, Y Matsui, and Y Tokura. Topological spin textures in the helimagnet fege. *Physical Review B*, 77(18):184402, 2008.
- [28] XZ Yu, N Kanazawa, Y Onose, K Kimoto, WZ Zhang, S Ishiwata, Y Matsui, and Y Tokura. Near room-temperature formation of a skyrmion crystal in thin-films of the helimagnet fege. *Nature materials*, 10(2):106–109, 2011.
- [29] Heribert Wilhelm, Michael Baenitz, Marcus Schmidt, UK Rößler, AA Leonov, and AN Bogdanov. Precursor phenomena at the magnetic ordering of the cubic helimagnet fege. *Physical Review Letters*, 107(12):127203, 2011.
- [30] Ulrich K Rößler, Andrei A Leonov, and Alexei N Bogdanov. Chiral skyrmionic matter in non-centrosymmetric magnets. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 303, page 012105. IOP Publishing, 2011.
- [31] AO Leonov, TL Monchesky, N Romming, A Kubetzka, AN Bogdanov, and R Wiesendanger. The properties of isolated chiral skyrmions in thin magnetic films. *New Journal of Physics*, 18(6):065003, 2016.
- [32] Cristina Bran, Anna B Butenko, Nikolai S Kiselev, Ulrike Wolff, Ludwig Schultz, Olav Hellwig, Ulrich K Rößler, Alexei N Bogdanov, and Volker Neu. Evolution of stripe and bubble domains in antiferromagnetically coupled [(co/pt) 8/co/ru] 18 multilayers. *Physical Review B*, 79(2):024430, 2009.
- [33] A Hubert and Rudolf Schäfer. Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures, 1998.
- [34] K Shibata, XZ Yu, T Hara, D Morikawa, N Kanazawa, K Kimoto, S Ishiwata, Y Matsui, and Y Tokura. Towards control of the size and helicity of skyrmions in helimagnetic alloys by spin-orbit coupling. *Nature nanotechnology*, 8(10):723–728, 2013.
- [35] Christian Pfleiderer, T Adams, Andreas Bauer, W Biberacher, Benedikt Binz, F Birkelbach, Peter Böni, C Franz, R Georgii, M Janoschek, et al. Skyrmion lattices in metallic and semiconducting b20 transition metal compounds. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22(16):164207, 2010.
- [36] Shinichiro Seki, XZ Yu, S Ishiwata, and Y Tokura. Observation of skyrmions in a multiferroic material. *Science*, 336(6078):198–201, 2012.
- [37] T Adams, A Chacon, M Wagner, A Bauer, G Brandl, B Pedersen, H Berger, P Lemmens, and C Pfleiderer. Long-wavelength helimagnetic order and skyrmion lattice phase in cu 2 oseo 3. *Physical review letters*, 108(23):237204, 2012.
- [38] Igor Dzyaloshinsky. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 4(4):241–255, 1958.
- [39] Tôru Moriya. New mechanism of anisotropic superexchange interaction. *Physical Review Letters*, 4(5):228, 1960.

- [40] Masahiro Nagao, Yeong-Gi So, Hiroyuki Yoshida, Masaaki Isobe, Toru Hara, Kazuo Ishizuka, and Koji Kimoto. Direct observation and dynamics of spontaneous skyrmion-like magnetic domains in a ferromagnet. *Nature nanotechnology*, 8(5):325–328, 2013.
- [41] Jae-yoon Choi, Woo Jin Kwon, and Yong-il Shin. Observation of topologically stable 2d skyrmions in an antiferromagnetic spinor bose-einstein condensate. *Physical review letters*, 108(3):035301, 2012.
- [42] John Michael Kosterlitz and David James Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(7):1181, 1973.
- [43] JM Kosterlitz. The critical properties of the two-dimensional xy model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 7(6):1046, 1974.
- [44] Hikaru Kawamura and Seiji Miyashita. Phase transition of the two-dimensional heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice. *Journal of the Physical Society of Japan*, 53(12):4138–4154, 1984.
- [45] Ye-Hua Liu and You-Quan Li. A mechanism to pin skyrmions in chiral magnets. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(7):076005, 2013.
- [46] Shi-Zeng Lin, Charles Reichhardt, and Avadh Saxena. Manipulation of skyrmions in nanodisks with a current pulse and skyrmion rectifier. *Applied Physics Letters*, 102(22):222405, 2013.
- [47] XZ Yu, Naoya Kanazawa, WZ Zhang, T Nagai, Toru Hara, Koji Kimoto, Yoshio Matsui, Yoshinori Onose, and Yoshinori Tokura. Skyrmion flow near room temperature in an ultralow current density. *Nature communications*, 3(1):1–6, 2012.
- [48] Tomek Schulz, R Ritz, Andreas Bauer, Madhumita Halder, Martin Wagner, Chris Franz, Christian Pfleiderer, Karin Everschor, Markus Garst, and Achim Rosch. Emergent electrodynamics of skyrmions in a chiral magnet. *Nature Physics*, 8(4):301–304, 2012.
- [49] L Sun, RX Cao, BF Miao, Z Feng, B You, D Wu, W Zhang, An Hu, and HF Ding. Creating an artificial two-dimensional skyrmion crystal by nanopatterning. *Physical review letters*, 110(16):167201, 2013.
- [50] J Sampaio, V Cros, S Rohart, A Thiaville, and A Fert. Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures. *Nature nanotechnology*, 8(11):839–844, 2013.
- [51] R Tomasello, E Martinez, R Zivieri, L Torres, M Carpentieri, and G Finocchio. A strategy for the design of skyrmion racetrack memories. *Scientific reports*, 4:6784, 2014.
- [52] Stuart SP Parkin, Masamitsu Hayashi, and Luc Thomas. Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*, 320(5873):190–194, 2008.

- [53] Albert Fert, Vincent Cros, and Joao Sampaio. Skyrmions on the track. *Nature nanotechnology*, 8(3):152–156, 2013.
- [54] Xichao Zhang, Motohiko Ezawa, Dun Xiao, GP Zhao, Yaowen Liu, and Yan Zhou. All-magnetic control of skyrmions in nanowires by a spin wave. *Nanotechnology*, 26(22):225701, 2015.
- [55] Yan Zhou and Motohiko Ezawa. A reversible conversion between a skyrmion and a domain-wall pair in a junction geometry. *Nature communications*, 5(1):1–8, 2014.
- [56] Xichao Zhang, Motohiko Ezawa, and Yan Zhou. Magnetic skyrmion logic gates: conversion, duplication and merging of skyrmions. *Scientific reports*, 5(1):1–8, 2015.
- [57] J Ping Liu, Zhidong Zhang, and Guoping Zhao. *Skyrmions: topological structures, properties, and applications*. CRC Press, 2016.
- [58] SL Sondhi, A Karlhede, SA Kivelson, and EH Rezayi. Skyrmions and the crossover from the integer to fractional quantum hall effect at small zeeman energies. *Physical Review B*, 47(24):16419, 1993.
- [59] Steven M Girvin. Spin and isospin: exotic order in quantum hall ferromagnets. 2000.
- [60] David C Wright and N David Mermin. Crystalline liquids: the blue phases. *Reviews of Modern physics*, 61(2):385, 1989.
- [61] Tin-Lun Ho. Spinor bose condensates in optical traps. *Physical Review Letters*, 81(4):742, 1998.
- [62] Stephen Blundell. Magnetism in condensed matter, 2001.
- [63] Ralph Skomski. *Simple models of magnetism*. Oxford University Press on Demand, 2008.
- [64] Neil W Ashcroft and N David Mermin. Solid state physics. thomson learning. *Inc., Florence*, 1976.
- [65] Roger Balian. *From microphysics to macrophysics: methods and applications of statistical physics*, volume 1. Springer Science & Business Media, 2007.
- [66] Eva Pavarini, Erik Koch, Frithjof Anders, and Mark Jarrell. Correlated electrons: from models to materials. *Reihe Modeling and Simulation*, 2, 2012.
- [67] Philip W Anderson. New approach to the theory of superexchange interactions. *Physical Review*, 115(1):2, 1959.
- [68] LO Manuel, CJ Gazza, AE Trumper, and HA Ceccatto. Heisenberg model with dzyaloshinskii-moriya interaction: A mean-field schwinger-boson study. *Physical Review B*, 54(18):12946, 1996.
- [69] K_V Kavokin. Anisotropic exchange interaction of localized conduction-band electrons in semiconductors. *Physical Review B*, 64(7):075305, 2001.

- [70] Tôru Moriya. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical Review*, 120(1):91, 1960.
- [71] Kai Di, Vanessa Li Zhang, Hock Siah Lim, Ser Choon Ng, Meng Hau Kuok, Jiawei Yu, Jungbum Yoon, Xuepeng Qiu, and Hyunsoo Yang. Direct observation of the dzyaloshinskii-moriya interaction in a pt/co/ni film. *Physical review letters*, 114(4):047201, 2015.
- [72] Hongxin Yang, André Thiaville, Stanislas Rohart, Albert Fert, and Mairbek Chshiev. Anatomy of dzyaloshinskii-moriya interaction at co/pt interfaces. *Physical review letters*, 115(26):267210, 2015.
- [73] Mohamed Belmeguenai, Jean-Paul Adam, Yves Roussigné, Sylvain Eimer, Thibaut Devolder, Joo-Von Kim, Salim Mourad Cherif, Andrey Stashkevich, and André Thiaville. Interfacial dzyaloshinskii-moriya interaction in perpendicularly magnetized pt/co/alo x ultrathin films measured by brillouin light spectroscopy. *Physical Review B*, 91(18):180405, 2015.
- [74] Durga Khadka, Sabit Karayev, and SX Huang. Dzyaloshinskii–moriya interaction in pt/co/ir and pt/co/ru multilayer films. *Journal of Applied Physics*, 123(12):123905, 2018.
- [75] Jacques Villain. Insulating spin glasses. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 33(1):31–42, 1979.
- [76] G Toulouse. Theory of the frustration effect in spin glasses: I. *Spin Glass Theory and Beyond: An Introduction to the Replica Method and Its Applications*, 9:99, 1987.
- [77] J Vannimenus and G Toulouse. Theory of the frustration effect. ii. ising spins on a square lattice. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 10(18):L537, 1977.
- [78] HT Diep et al. *Frustrated spin systems*. World Scientific, 2013.
- [79] Hung T Diep. Phase transition in frustrated magnetic thin film physics at phase boundaries. *Entropy*, 21(2):175, 2019.
- [80] Roderich Moessner. Magnets with strong geometric frustration. *Canadian journal of physics*, 79(11-12):1283–1294, 2001.
- [81] John A Mydosh. *Spin glasses: an experimental introduction*. CRC Press, 2014.
- [82] Sang-Wook Cheong and Maxim Mostovoy. Multiferroics: a magnetic twist for ferroelectricity. *Nature materials*, 6(1):13, 2007.
- [83] Hosho Katsura, Naoto Nagaosa, and Alexander V Balatsky. Spin current and magnetoelectric effect in noncollinear magnets. *Physical review letters*, 95(5):057205, 2005.
- [84] Chenglong Jia, Shigeki Onoda, Naoto Nagaosa, and Jung Hoon Han. Bond electronic polarization induced by spin. *Physical Review B*, 74(22):224444, 2006.

- [85] Chenglong Jia, Shigeki Onoda, Naoto Nagaosa, and Jung Hoon Han. Microscopic theory of spin-polarization coupling in multiferroic transition metal oxides. *Physical Review B*, 76(14):144424, 2007.
- [86] Ji-Hui Yang, Zheng-Lu Li, XZ Lu, M-H Whangbo, Su-Huai Wei, XG Gong, and HJ Xiang. Strong dzyaloshinskii-moriya interaction and origin of ferroelectricity in Cu_2OSeO_3 . *Physical Review Letters*, 109(10):107203, 2012.
- [87] Masahito Mochizuki and Shinichiro Seki. Dynamical magnetoelectric phenomena of multiferroic skyrmions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 27(50):503001, 2015.
- [88] S Seki, S Ishiwata, and Y Tokura. Magnetoelectric nature of skyrmions in a chiral magnetic insulator Cu_2OSeO_3 . *Physical Review B*, 86(6):060403, 2012.
- [89] Shinichiro Seki, XZ Yu, S Ishiwata, and Yoshinori Tokura. Observation of skyrmions in a multiferroic material. *Science*, 336(6078):198–201, 2012.
- [90] R. Rajaraman. *Solitons and Instantons*. North Holland, 1989.
- [91] Alexei M Tselik. *Quantum field theory in condensed matter physics*. Cambridge university press, 2007.
- [92] Hans-Benjamin Braun. Topological effects in nanomagnetism: from superparamagnetism to chiral quantum solitons. *Advances in Physics*, 61(1):1–116, 2012.
- [93] Somendra Mohan Bhattacharjee, Mahan Mj, and Abhijit Bandyopadhyay. *Topology and Condensed Matter Physics*, volume 19. Springer, 2017.
- [94] Mikio Nakahara. *Geometry, topology and physics*. CRC Press, 2003.
- [95] N David Mermin. The topological theory of defects in ordered media. *Reviews of Modern Physics*, 51(3):591, 1979.
- [96] Daniel Cabra, Gustavo S Lozano, and Fidel A Schaposnik. Magnetic structures and $z=2$ vortices in a non-abelian gauge model. *Physical Review D*, 92(12):124033, 2015.
- [97] T Dombre and N Read. Nonlinear σ models for triangular quantum antiferromagnets. *Physical Review B*, 39(10):6797, 1989.
- [98] C Back, V Cros, H Ebert, K Everschor-Sitte, A Fert, M Garst, Tianping Ma, S Mankovsky, TL Monchesky, M Mostovoy, et al. The 2020 skyrmionics roadmap. *arXiv preprint arXiv:2001.00026*, 2019.
- [99] B Lebech, P Harris, J Skov Pedersen, Kell Mortensen, CI Gregory, NR Bernhoeft, M Jermy, and SA Brown. Magnetic phase diagram of MnSi . *Journal of magnetism and magnetic materials*, 140:119–120, 1995.
- [100] I Kézsmárki, S Bordács, P Milde, E Neuber, LM Eng, JS White, Henrik M Rønnow, CD Dewhurst, M Mochizuki, K Yanai, et al. Néel-type skyrmion lattice with confined orientation in the polar magnetic semiconductor GaV_4S_8 . *Nature materials*, 14(11):1116, 2015.

- [101] Y Okamura, F Kagawa, S Seki, and Y Tokura. Transition to and from the skyrmion lattice phase by electric fields in a magnetoelectric compound. *Nature communications*, 7:12669, 2016.
- [102] JS White, K Prša, P Huang, AA Omrani, I Živković, M Bartkowiak, H Berger, A Magrez, JL Gavilano, G Nagy, et al. Electric-field-induced skyrmion distortion and giant lattice rotation in the magnetoelectric insulator Cu_2OSeO_3 . *Physical Review Letters*, 113(10):107203, 2014.
- [103] Wanjun Jiang, Wei Zhang, Guoqiang Yu, M Benjamin Jungfleisch, Pramey Upadhyaya, Hamoud Smailly, John E Pearson, Yaroslav Tserkovnyak, Kang L Wang, Olle Heinonen, et al. Mobile néel skyrmions at room temperature: status and future. *AIP Advances*, 6(5):055602, 2016.
- [104] Seonghoon Woo, Kai Litzius, Benjamin Krüger, Mi-Young Im, Lucas Caretta, Kornel Richter, Maxwell Mann, Andrea Krone, Robert M Reeve, Markus Weigand, et al. Observation of room-temperature magnetic skyrmions and their current-driven dynamics in ultrathin metallic ferromagnets. *Nature materials*, 15(5):501, 2016.
- [105] A. A. Thiele. The theory of cylindrical magnetic domains. *Bell Syst. Tech. J.*, 8:3287, Dec 1969.
- [106] A. A. Thiele. Theory of the static stability of cylindrical domains in uniaxial platelets. *J. Appl. Phys.*, 41:1139, Mar 1970.
- [107] W. J. DeBonte. Theory of the static stability of thick-walled cylindrical domains in uniaxial platelets. *AIP Conf. Proc.*, 5:140, 1972.
- [108] K Shibata, J Iwasaki, N Kanazawa, S Aizawa, T Tanigaki, M Shirai, T Nakajima, M Kubota, M Kawasaki, HS Park, et al. Large anisotropic deformation of skyrmions in strained crystal. *Nature nanotechnology*, 10(7):589–592, 2015.
- [109] S. A. Osorio, M. B. Sturla, H. D. Rosales, and D. C. Cabra. Stability of skyrmions in perturbed ferromagnetic chiral magnets. *Phys. Rev. B*, 99:064439, Feb 2019.
- [110] Imam Makhfudz, Benjamin Krüger, and Oleg Tchernyshyov. Inertia and chiral edge modes of a skyrmion magnetic bubble. *Physical Review Letters*, 109(21):217201, 2012.
- [111] Shi-Zeng Lin and Avadh Saxena. Noncircular skyrmion and its anisotropic response in thin films of chiral magnets under a tilted magnetic field. *Physical Review B*, 92(18):180401, 2015.
- [112] Masahito Mochizuki and Shinichiro Seki. Magnetoelectric resonances and predicted microwave diode effect of the skyrmion crystal in a multiferroic chiral-lattice magnet. *Physical Review B*, 87(13):134403, 2013.
- [113] Masahito Mochizuki and Yoshio Watanabe. Writing a skyrmion on multiferroic materials. *Applied Physics Letters*, 107(8):082409, 2015.

- [114] Masahito Mochizuki. Creation of skyrmions by electric field on chiral-lattice magnetic insulators. *Advanced Electronic Materials*, 2(1):1500180, 2016.
- [115] Jung Hoon Han, Jiadong Zang, Zhihua Yang, Jin-Hong Park, and Naoto Nagao-sa. Skyrmion lattice in a two-dimensional chiral magnet. *Physical Review B*, 82(9):094429, 2010.
- [116] Chao Wang, Haifeng Du, Xuebing Zhao, Chiming Jin, Mingliang Tian, Yuheng Zhang, and Renchao Che. Enhanced stability of the magnetic skyrmion lattice phase under a tilted magnetic field in a two-dimensional chiral magnet. *Nano letters*, 17(5):2921–2927, 2017.
- [117] J S White, I Levatic, A A Omrani, N Egetenmeyer, K Prsa, I Zivkovic, J L Gavilano, J Kohlbrecher, M Bartkowiak, H Berger, and H M Ronnow. Electric field control of the skyrmion lattice in Cu_2OSeO_3 . *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24(43):432201, 2012.
- [118] Alexei A Abrikosov. On the magnetic properties of superconductors of the second group. *Sov. Phys. JETP*, 5:1174–1182, 1957.
- [119] A Tonomura, H Kasai, O Kamimura, T Matsuda, K Harada, Y Nakayama, J Shimoyama, K Kishio, T Hanaguri, K Kitazawa, et al. Observation of individual vortices trapped along columnar defects in high-temperature superconductors. *Nature*, 412(6847):620, 2001.
- [120] Tsuyoshi Okubo, Sungki Chung, and Hikaru Kawamura. Multiple-q states and the skyrmion lattice of the triangular-lattice heisenberg antiferromagnet under magnetic fields. *Physical Review Letters*, 108(1):017206, 2012.
- [121] John H Mathews, Kurtis D Fink, et al. *Numerical methods using MATLAB*, volume 4. Pearson Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 2004.
- [122] J. A. Nelder and R. Mead. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal*, 7(4):308–313, 1965.
- [123] W Münzer, A Neubauer, T Adams, S Mühlbauer, C Franz, F Jonietz, R Georgii, P Böni, B Pedersen, M Schmidt, et al. Skyrmion lattice in the doped semiconductor $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. *Physical Review B*, 81(4):041203, 2010.
- [124] XZ Yu, Naoya Kanazawa, Yoshinori Onose, K Kimoto, WZ Zhang, Shintaro Ishiwata, Yoshio Matsui, and Yoshinori Tokura. Near room-temperature formation of a skyrmion crystal in thin-films of the helimagnet FeGe . *Nature materials*, 10(2):106, 2011.
- [125] Xiuzhen Yu, Akiko Kikkawa, Daisuke Morikawa, Kiyoo Shibata, Yusuke Tokunaga, Yasujiro Taguchi, and Yoshinori Tokura. Variation of skyrmion forms and their stability in MnSi thin plates. *Physical Review B*, 91(5):054411, 2015.
- [126] A Bogdanov and A Hubert. The stability of vortex-like structures in uniaxial ferromagnets. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 195(1):182–192, 1999.

- [127] Per Bak and M Høgh Jensen. Theory of helical magnetic structures and phase transitions in mnsi and fege. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 13(31):L881, 1980.
- [128] MN Wilson, AB Butenko, AN Bogdanov, and TL Monchesky. Chiral skyrmions in cubic helimagnet films: The role of uniaxial anisotropy. *Physical Review B*, 89(9):094411, 2014.
- [129] MN Wilson, EA Karhu, AS Quigley, UK Rößler, AB Butenko, AN Bogdanov, MD Robertson, and TL Monchesky. Extended elliptic skyrmion gratings in epitaxial mnsi thin films. *Physical Review B*, 86(14):144420, 2012.
- [130] Tomoyuki Yokouchi, Naoya Kanazawa, Atsushi Tsukazaki, Yusuke Kozuka, Akiko Kikkawa, Yasujiro Taguchi, Masashi Kawasaki, Masakazu Ichikawa, Fumitaka Kagawa, and Yoshinori Tokura. Formation of in-plane skyrmions in epitaxial mnsi thin films as revealed by planar hall effect. *Journal of the Physical Society of Japan*, 84(10):104708, 2015.
- [131] SX Huang and CL Chien. Extended skyrmion phase in epitaxial fege (111) thin films. *Physical review letters*, 108(26):267201, 2012.
- [132] SA Montoya, S Couture, JJ Chess, JCT Lee, N Kent, D Henze, SK Sinha, M-Y Im, SD Kevan, P Fischer, et al. Tailoring magnetic energies to form dipole skyrmions and skyrmion lattices. *Physical Review B*, 95(2):024415, 2017.
- [133] E Karhu, S Kahwaji, TL Monchesky, C Parsons, MD Robertson, and C Maunders. Structure and magnetic properties of mnsi epitaxial thin films. *Physical Review B*, 82(18):184417, 2010.
- [134] EA Karhu, S Kahwaji, MD Robertson, H Fritzsche, Brian J Kirby, Charles F Majkrzak, and TL Monchesky. Helical magnetic order in mnsi thin films. *Physical Review B*, 84(6):060404, 2011.
- [135] MN Wilson, EA Karhu, DP Lake, AS Quigley, S Meynell, AN Bogdanov, H Fritzsche, UK Rößler, and TL Monchesky. Discrete helicoidal states in chiral magnetic thin films. *Physical Review B*, 88(21):214420, 2013.
- [136] FN Rybakov, AB Borisov, and AN Bogdanov. Three-dimensional skyrmion states in thin films of cubic helimagnets. *Physical Review B*, 87(9):094424, 2013.
- [137] Filipp N Rybakov, Aleksandr B Borisov, Stefan Blügel, and Nikolai S Kiselev. New type of stable particlelike states in chiral magnets. *Physical review letters*, 115(11):117201, 2015.
- [138] SA Meynell, MN Wilson, H Fritzsche, AN Bogdanov, and TL Monchesky. Surface twist instabilities and skyrmion states in chiral ferromagnets. *Physical Review B*, 90(1):014406, 2014.

- [139] AO Leonov, Y Togawa, TL Monchesky, AN Bogdanov, J Kishine, Y Kousaka, M Miyagawa, T Koyama, Jun Akimitsu, Ts Koyama, et al. Chiral surface twists and skyrmion stability in nanolayers of cubic helimagnets. *Physical review letters*, 117(8):087202, 2016.
- [140] Philip W Anderson. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *science*, 235(4793):1196–1198, 1987.
- [141] Mario Norberto Baibich, Jean Marc Broto, Albert Fert, F Nguyen Van Dau, Frédéric Petroff, P Etienne, G Creuzet, A Friederich, and J Chazelas. Giant magnetoresistance of (001) $\text{Fe}/(001)$ Cr magnetic superlattices. *Physical review letters*, 61(21):2472, 1988.
- [142] Grünberg Binasch, Peter Grünberg, F Saurenbach, and W Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical review B*, 39(7):4828, 1989.
- [143] Albert Fert. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics. *Reviews of modern physics*, 80(4):1517, 2008.
- [144] AN Bogdanov and DA Yablonskii. Contribution to the theory of inhomogeneous states of magnets in the region of magnetic-field-induced phase transitions. mixed state of antiferromagnets. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 96:253, 1989. [Sov. Phys. JETP **69**, 142 (1989)].
- [145] H. D. Rosales, D. C. Cabra, and Pierre Pujol. Three-sublattice skyrmion crystal in the antiferromagnetic triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 92:214439, Dec 2015.
- [146] G Baskaran. Possibility of skyrmion superconductivity in doped antiferromagnet $\text{K}_{-2}\text{Fe}_{-4}\text{Se}_{-5}$. *arXiv preprint arXiv:1108.3562*, 2011.
- [147] Jiadong Zang, Maxim Mostovoy, Jung Hoon Han, and Naoto Nagaosa. Dynamics of skyrmion crystals in metallic thin films. *Phys. Rev. Lett.*, 107:136804, 2011.
- [148] S. A. Osorio, H. D. Rosales, M. B. Sturla, and D. C. Cabra. Composite spin crystal phase in antiferromagnetic chiral magnets. *Phys. Rev. B*, 96:024404, Jul 2017.
- [149] Ian Affleck. Quantum spin chains and the haldane gap. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1(19):3047, 1989.
- [150] L Benfatto, M Silva Neto, V Juricic, and C Morais Smith. Derivation of the generalized non-linear sigma model in the presence of the dzyaloshinskii–moriya interaction. *Physica B: Condensed Matter*, 378:449–450, 2006.
- [151] Daniel C Cabra and Pierre Pujol. Field-theoretical methods in quantum magnetism. In *Quantum Magnetism*, pages 253–305. Springer, 2004.
- [152] Eduardo Fradkin. *Field theories of condensed matter physics*. Cambridge University Press, 2013.

- [153] AN Bogdanov, UK Röfller, M Wolf, and K-H Müller. Magnetic structures and reorientation transitions in noncentrosymmetric uniaxial antiferromagnets. *Physical Review B*, 66(21):214410, 2002.
- [154] Rick Keesman, Mark Raaijmakers, A. E. Baerends, G. T. Barkema, and R. A. Duine. Skyrmions in square-lattice antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 94:054402, Aug 2016.
- [155] AO Leonov and M Mostovoy. Multiply periodic states and isolated skyrmions in an anisotropic frustrated magnet. *Nature Communications*, 6(1):1–8, 2015.
- [156] Shi-Zeng Lin and Satoru Hayami. Ginzburg-landau theory for skyrmions in inversion-symmetric magnets with competing interactions. *Physical Review B*, 93(6):064430, 2016.
- [157] Xichao Zhang, Jing Xia, Yan Zhou, Xiaoxi Liu, Han Zhang, and Motohiko Ezawa. Skyrmion dynamics in a frustrated ferromagnetic film and current-induced helicity locking-unlocking transition. *Nature Communications*, 8(1):1–10, 2017.
- [158] Thomas TJ Mutter, Andrey O Leonov, and Katsuya Inoue. Skyrmion instabilities and distorted spiral states in a frustrated chiral magnet. *Physical Review B*, 100(6):060407, 2019.
- [159] Kosuke Karube, Jonathan S White, Daisuke Morikawa, Charles D Dewhurst, Robert Cubitt, Akiko Kikkawa, Xiuzhen Yu, Yusuke Tokunaga, Taka-hisa Arima, Henrik M Rønnow, et al. Disordered skyrmion phase stabilized by magnetic frustration in a chiral magnet. *Science Advances*, 4(9):eaar7043, 2018.
- [160] Takashi Kurumaji, Taro Nakajima, Max Hirschberger, Akiko Kikkawa, Yuichi Yamasaki, Hajime Sagayama, Hironori Nakao, Yasujiro Taguchi, Taka-hisa Arima, and Yoshinori Tokura. Skyrmion lattice with a giant topological hall effect in a frustrated triangular-lattice magnet. *Science*, 365(6456):914–918, 2019.
- [161] Kenya Ohgushi, Shuichi Murakami, and Naoto Nagaosa. Spin anisotropy and quantum hall effect in the kagomé lattice: Chiral spin state based on a ferromagnet. *Physical Review B*, 62(10):R6065, 2000.
- [162] ME Villalba, FA Gómez Albarracín, HD Rosales, and DC Cabra. Field-induced pseudo-skyrmion phase in the antiferromagnetic kagome lattice. *Physical Review B*, 100(24):245106, 2019.
- [163] MV Gvozdkova, PE Melchy, and ME Zhitomirsky. Magnetic phase diagrams of classical triangular and kagome antiferromagnets. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23(16):164209, 2011.
- [164] Luis Seabra, Tsutomu Momoi, Philippe Sindzingre, and Nic Shannon. Phase diagram of the classical heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice in an applied magnetic field. *Physical Review B*, 84(21):214418, 2011.
- [165] M Mohyl'na and M Žukovič. Emergence of a skyrmion phase in a frustrated heisenberg antiferromagnet with dzyaloshinskii-moriya interaction. *arXiv preprint arXiv:1905.11501*, 2019.

- [166] Sebastián A Díaz, Jelena Klinovaja, and Daniel Loss. Topological magnons and edge states in antiferromagnetic skyrmion crystals. *Physical review letters*, 122(18):187203, 2019.
- [167] Ioannis Rousochatzakis, Ulrich K. Rössler, Jeroen van den Brink, and Maria Daghofer. Kitaev anisotropy induces mesoscopic z_2 vortex crystals in frustrated hexagonal antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 93:104417, Mar 2016.
- [168] S. A. Osorio, M. B. Sturla, H. D. Rosales, and D. C. Cabra. From skyrmions to z_2 vortices in distorted chiral antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 100:220404, Dec 2019.
- [169] T Nagamiya. Solid state physics. *Academic Press, New York*, 20:305, 1967.
- [170] JM Luttinger and L Tisza. Theory of dipole interaction in crystals. *Physical Review*, 70(11-12):954, 1946.
- [171] Hidetoshi Nishimori and Gerardo Ortiz. *Elements of phase transitions and critical phenomena*. OUP Oxford, 2010.
- [172] Nigel Goldenfeld. *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. CRC Press, 2018.
- [173] Michael Becker, Maria Hermanns, Bela Bauer, Markus Garst, and Simon Trebst. Spin-orbit physics of $j = \frac{1}{2}$ mott insulators on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 91:155135, Apr 2015.
- [174] Daniel Bernard Litvin. The luttinger-tisza method. *Physica*, 77(2):205–219, 1974.
- [175] John Willard Milnor and David W Weaver. *Topology from the differentiable viewpoint*. Princeton university press, 1997.
- [176] Jun John Sakurai, Jim Napolitano, et al. *Modern quantum mechanics*, volume 185. Pearson Harlow, 2014.
- [177] Tsuyoshi Okubo and Hikaru Kawamura. Signature of a z_2 vortex in the dynamical correlations of the triangular-lattice heisenberg antiferromagnet. *Journal of the Physical Society of Japan*, 79(8):084706, 2010.
- [178] Christian Griset, Shane Head, Jason Alicea, and Oleg A Starykh. Deformed triangular lattice antiferromagnets in a magnetic field: Role of spatial anisotropy and dzyaloshinskii-moriya interactions. *Physical Review B*, 84(24):245108, 2011.
- [179] Sedigh Ghamari, Catherine Kallin, Sung-Sik Lee, and Erik S Sørensen. Order in a spatially anisotropic triangular antiferromagnet. *Physical Review B*, 84(17):174415, 2011.
- [180] Lorenzo Camosi, Stanislas Rohart, Olivier Fruchart, Stefania Pizzini, Mohamed Belmeguenai, Yves Roussigné, Andreï Stashkevich, Salim Mourad Cherif, Laurent Ranno, Maurizio De Santis, et al. Anisotropic dzyaloshinskii-moriya interaction in ultrathin epitaxial au/co/w (110). *Physical Review B*, 95(21):214422, 2017.

-
- [181] Volodymyr P Kravchuk, Ulrich K Röfler, Oleksii M Volkov, Denis D Sheka, Jeroen van den Brink, Denys Makarov, Hagen Fuchs, Hans Fangohr, and Yuri Gaididei. Topologically stable magnetization states on a spherical shell: Curvature-stabilized skyrmions. *Physical Review B*, 94(14):144402, 2016.
- [182] Xiaohong Huo and Yan Liu. The stability of a skyrmion in a nanotube. *New Journal of Physics*, 21(9):093024, 2019.
- [183] Dimitris Kechrakos, Aristotelis Patsopoulos, and Lida Tzannetou. Magnetic skyrmions in cylindrical ferromagnetic nanostructures with chiral interactions. *arXiv preprint arXiv:1909.09474*, 2019.
- [184] N David Mermin and Herbert Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17(22):1133, 1966.
- [185] VL Berezinsky. Destruction of long range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group. i. classical systems. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 32:493–500, 1970.
- [186] VL Berezinsky. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems possessing a continuous symmetry group. ii. quantum systems. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 61:610, 1972.