

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
Programa de Pós-Graduação em Física

**Fases moduladas em filmes magnéticos  
ultrafinos com anisotropia perpendicular:  
modelos e simulações<sup>†</sup>**

Lucas Nicolao

*Tese realizada sob a orientação do Prof. Dr. Daniel  
Adrián Stariolo, apresentada ao Instituto de Física  
da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos  
para a obtenção do grau de Doutor em Ciências.*

*Porto Alegre, Julho de 2009.*

---

<sup>†</sup>Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

## Agradecimentos

Este trabalho só se tornou possível através do apoio e companheirismo do meu orientador, Daniel Adrián Stariolo, a quem sou muito grato. Agradeço também a minha família, meus pais Geraldo e Adriana, e meus irmãos Leonardo e Maurício, por sempre estarem comigo. A minha amada Carolina Seibel Chassot, que ilumina meu coração. Aos meus grandes amigos Wilson Simeoni Junior, Fernando Lucas Metz e Cristian Bonatto, por sempre me darem força e pelo companheirismo através de todos estes anos de física. Aos meus amigos Rafael Pezzi e Luciano Medina pela grande ajuda na confecção desta tese. Agradeço a todos ilustres professores que tive no IF-UFRGS, e ao CNPq pelo apoio financeiro.

*Dedico este trabalho a minha família.*

## Resumo

Neste trabalho estudamos os fenômenos observados em filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular, onde domínios razoavelmente regulares de faixas dominam o regime de baixas temperaturas a campo nulo. Esses domínios magnéticos de faixas constituem uma realização de fases moduladas presentes em inúmeros sistemas físicos, químicos e biológicos, e são resultados da presença de interações competindo em diferentes escalas espaciais. No caso de interesse, a competição entre as interações de troca e dipolar levam à estabilidade de uma estrutura de domínios de faixas que possuem ambas ordens translacional anisotrópica e orientacional, semelhantes às encontradas em filmes de cristais líquidos. Através de um modelo escalar de Landau Ginzburg que captura a formação dos domínios de faixas nos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular, estudamos o efeito das flutuações térmicas atuando nas escalas de comprimento introduzidas pela competição entre as interações, que, aliadas à baixa dimensionalidade do problema, estabelecem fases ordenadas de baixa temperatura com ordem de quase longo alcance, onde defeitos topológicos exercem um papel fundamental. Introduzimos uma técnica de simulação de Langevin para o modelo de Landau Ginzburg, através da qual obtivemos resultados de equilíbrio determinando a natureza das fases de baixa temperatura. Confirmamos junto aos resultados experimentais a estabilidade de uma fase esmética, associada à quebra de simetria translacional, em baixas temperaturas. Entre essa fase e a fase isotrópica, encontramos resultados que apontam a estabilidade da fase nemática, associada à quebra de simetria orientacional, que é prevista teoricamente mas não foi ainda observada experimentalmente. A simulação de Langevin introduzida aqui se mostrou capaz de reproduzir fenômenos como a dependência da largura das faixas com a temperatura e o perfil das paredes de domínio, assim como flutuações térmicas e defeitos topológicos das faixas, muito próximos aos observados experimentalmente.

# Abstract

In this work we study the phenomena observed in ultrathin magnetic films with perpendicular anisotropy, in which stripe domains with reasonable regularity dominate the low temperature regime under zero external applied field. These stripe magnetic domains are a manifestation of modulated phases present in a large number of physical, chemical and biological systems, and are the result of the presence of interactions competing in different spacial scales. In the case we are interested in, the competition between the exchange and dipolar interactions stabilize a stripe domain structure that have both translational anisotropic and orientational orders, similar to those found in liquid crystal films. Through a scalar Landau Ginzburg model that captures the stripe domain formation in ultrathin magnetic films with perpendicular anisotropy, we study the effect of thermal fluctuations acting in the length scales introduced by the competition of the interactions, that, together with the low dimensionality of the problem, stabilize low temperature ordered phases with quasi-long-range order, where topological defects play a fundamental role. We introduce here a Langevin simulation technique to the Landau Ginzburg model, through which we obtain equilibrium results determining the nature of the low temperature phases. We confirm, in agreement with experimental observations, the stability of a smectic phase, related to the break of translational symmetry. Between this phase and the isotropic phase, we find results that point to the stability of the nematic phase, related to the break of orientational symmetry, that is predicted theoretically but was not observed experimentally. The Langevin simulation introduced here is capable to reproduce some of the phenomena, like the stripe domain width temperature dependence and the domain wall profile, as well as stripe thermal fluctuations and topological defects, very close to those observed experimentally.

# Sumário

<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>1 Filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular</b>	<b>7</b>
1.1 Sistema experimental e modelo microscópico . . . . .	7
1.2 Modelo dipolar contínuo . . . . .	16
1.3 Campo médio . . . . .	19
1.4 Campo médio autoconsistente . . . . .	25
1.5 Hamiltoniano efetivo e a fase nemática . . . . .	27
1.6 Hamiltonianos elásticos . . . . .	30
<b>2 Simulações de Langevin</b>	<b>37</b>
2.1 Dinâmica de Langevin . . . . .	37
2.2 Implementação numérica . . . . .	41
2.3 Estado fundamental e a largura das faixas . . . . .	46
2.4 Fase nemática . . . . .	52
2.4.1 Parâmetros de ordem . . . . .	54
2.4.2 Correlações espaciais e fator de estrutura . . . . .	57
<b>Conclusão</b>	<b>69</b>
<b>Referências</b>	<b>73</b>
<b>A Cópia da publicação</b>	<b>80</b>

# Introdução

Em diversos sistemas magnéticos, de diferentes composições e formatos, surgem fases de equilíbrio que correspondem a estados de magnetização não homogênea no espaço, formando estruturas magnéticas que dependem do sistema específico. A morfologia dos diferentes tipos depende da sintonia entre as diferentes contribuições energéticas referentes aos parâmetros do material em questão. Alguns exemplos podem ser visualizados na figura 1. Em filmes finos magnéticos de alta coercividade, onde a anisotropia perpendicular é dominante, a observação de padrões regulares de magnetização alternada perpendicularmente ao plano data da década de 60 [1], quando já fora reconhecido o papel fundamental da interação entre a energia de troca e a energia desmagnetizante na formação dos domínios. A morfologia desses domínios é constituída basicamente de *bolhas* e *faixas*, e são denominados em geral por *domínios de faixas fortes* devido seu forte contraste em imagens obtidas por microscopia eletrônica - um exemplo pode ser visto na 1.c.

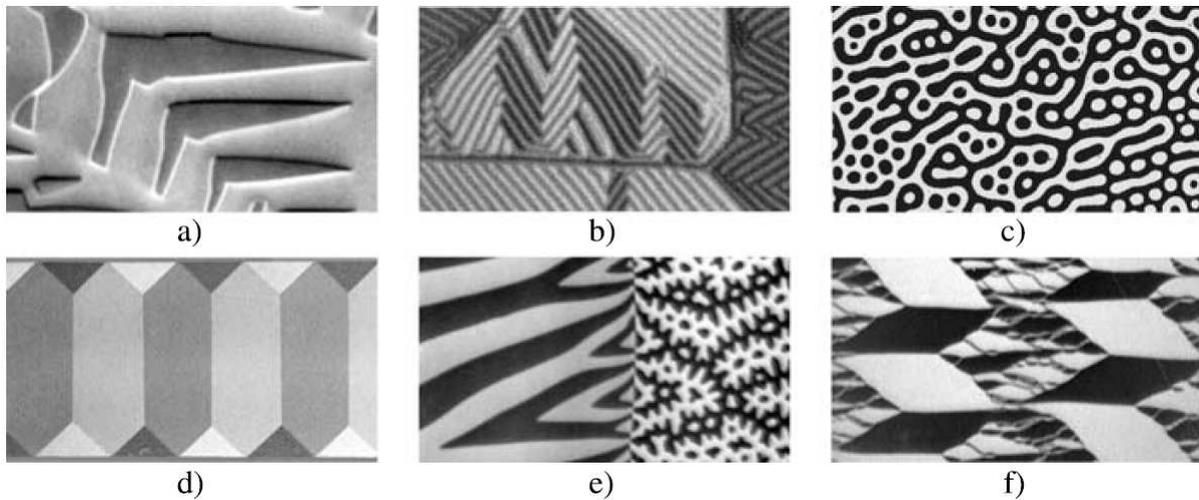


Figura 1: diferentes tipos de domínios magnéticos, adaptado de [2]. **a.** *domínios suplementares* **b.** *domínios de faixas fracas* **c.** *domínios de faixas fortes* **d.** *domínios de fechamento* **e.** *ramificação dos domínios* **f.** *bloco de Néel*.

Nos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular que vamos estudar neste trabalho, a origem microscópica da formação dos domínios regulares é semelhante.

Porém, os fenômenos que compõem esse sistema são distintos porque se trata de filmes de 1 a 10 camadas atômicas de um metal, depositado sobre um substrato de outro metal, como Fe sobre Cu e Co sobre Au. É portanto um sistema praticamente bidimensional, o que torna esses filmes um sistema-modelo apropriado para estudar a física em duas dimensões [3]. Como veremos ao longo desta tese, a baixa dimensionalidade introduz uma rica fenomenologia aos sistemas magnéticos, que tem correspondências com diversos outros sistemas bidimensionais como filmes de cristais líquidos, sólidos bidimensionais e interfaces cristalinas.

Além disso, a origem por trás da formação de padrões espaciais remete a uma classe muito mais ampla de sistemas físicos, químicos e biológicos que exibem texturas e padrões espaciais. No caso dos filmes finos magnéticos, os padrões espaciais de magnetização são fruto do balanço energético entre a interação de troca, ferromagnética de curto alcance, e a interação dipolar, antiferromagnética de longo alcance. Em muitos outros sistemas a formação de padrões espaciais regulares também é atribuída à presença de interações competindo em diferentes escalas de comprimento. As morfologias desses padrões de equilíbrio são manifestações de *fases moduladas*, que são caracterizadas pela variação espacial do parâmetro de ordem do sistema em questão. Em geral predominam padrões espaciais simples com algum grau de regularidade, como faixas e bolhas em sistemas bidimensionais, e camadas, tubos e estruturas esféricas em sistemas tridimensionais. O número de sistemas físicos, químicos e biológicos que apresentam essas fases moduladas é enciclopédico [4, 5], ainda assim destacamos alguns exemplos importantes no contexto deste trabalho como copolímeros de dibloco, microemulsões, sistemas Hall quânticos e a convecção de Rayleigh-Bénard. Embora esse contexto de fases moduladas permita estender qualitativamente aspectos da nossa análise a uma vasta classe de problemas bidimensionais, vamos sempre tratar de colocar nossos resultados em frente a fenomenologia encontrada nos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular.

No primeiro capítulo discutiremos em termos gerais o contexto experimental e teórico que será utilizado para posterior comparação com os resultados das simulações numéricas apresentadas no segundo capítulo. Começaremos apresentando a rica fenomenologia observada experimentalmente em filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular, juntamente com um modelo microscópico mínimo que captura ambos fenômenos de reorientação - quando os momentos magnéticos passam a apontar para fora do plano à medida que a temperatura efetiva é diminuída - e a formação de padrões de domínios - quando a temperatura é zero o sistema apresenta um estado fundamental de faixas em campo externo nulo. O tema central desta tese é estudar o efeito das flutuações térmicas sobre esse estado fundamental, que possui tanto ordem translacional quanto orientacional de longo alcance.

A seguir, no intuito de nos limitarmos ao fenômeno das fases moduladas de baixas temperaturas, introduziremos o modelo dipolar contínuo - objeto de estudo desta tese. Esse

é um modelo em escalas mesoscópicas para a componente perpendicular da magnetização e, por ser um Hamiltoniano efetivo de Landau-Ginzburg-Wilson, possibilita diversos tratamentos analíticos que serão analisados ao longo do primeiro capítulo. A nova escala de comprimento introduzida pela competição entre a interação de troca e a dipolar modifica a transição ferromagnética usual, onde na aproximação de campo médio para o modelo o sistema sofre uma transição de um estado paramagnético para uma fase modulada de faixas. No que concerne às transições de fases presentes no sistema essa não é uma boa aproximação em duas dimensões, mas ela permite termos contato com o papel da temperatura na largura característica dos domínios de faixas, propriedade essa quase sempre observada experimentalmente.

Como um primeiro passo para incluir flutuações a essa aproximação veremos que a nova escala de comprimento - o comprimento de modulação ajustado pelas forças relativas entre as interações - altera dramaticamente o efeito das flutuações térmicas nesse sistema, induzindo uma transição de primeira ordem entre o estado paramagnético e o estado de faixas. Nessa aproximação de campo médio autoconsistente, nós faremos uso da abordagem feita por Brazovskii (1975) [6] em modelos gerais para a formação de fases moduladas, colocando então o problema dos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular e o modelo dipolar contínuo em contato com a vasta classe de problemas que exibem fases moduladas mencionados anteriormente. No entanto, o caso estudado por Brazovskii pode não ser estendido para o problema dos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular, já que a energia do problema tem uma simetria rotacional contínua e a quebra dessa simetria com a passagem para um estado de faixas paralelas não pode se dar em duas dimensões, nos mesmos moldes do teorema de Mermin-Wagner [7].

Sendo assim, análises mais sofisticadas do modelo dipolar contínuo se fazem necessárias para contornar a baixa dimensionalidade aliada à isotropia do problema, que impedem que o sistema apresente ordem de longo alcance em temperaturas finitas. Mesmo assim, o sistema ainda pode sofrer transições de fases. Essas são análogas às transições do tipo Kosterlitz-Thouless [8] associadas à quebras de simetrias contínuas, onde a fase ordenada correspondente possui uma ordem de quase longo alcance - suas correlações espaciais decaem com uma lei de potência. Essa questão será considerada nas duas últimas seções do primeiro capítulo. As duas abordagens apresentadas são complementares, e ambas remetem a outros sistemas de baixa dimensionalidade que possuem as mesmas simetrias do sistema de faixas, os filmes de cristais líquidos esméticos. Esse sistema é composto por moléculas anisotrópicas alongadas, que interagem basicamente via volume excluído e são usualmente representadas por elipses ou hastes. Algumas fases encontradas nesses sistemas estão ilustradas na figura 2.

Na primeira abordagem, apresentaremos resultados recentes de Barci e Stariolo (2007) [10] que se utilizam de técnicas do grupo de renormalização no espaço de momentos para observar que o Hamiltoniano que descreve o modelo de Brazovskii, e por consequência o

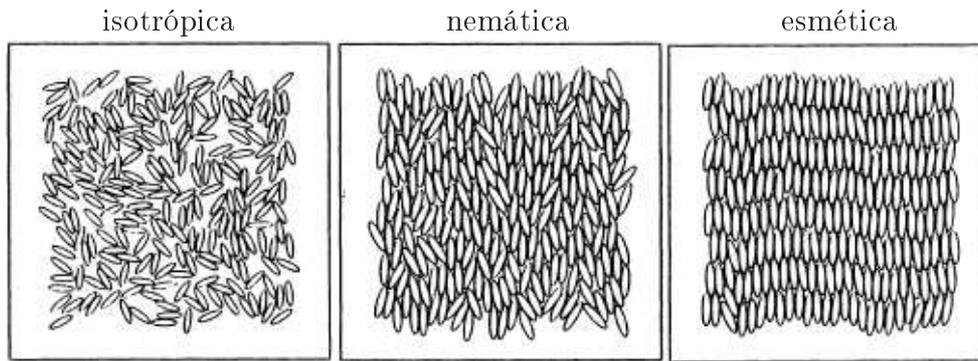


Figura 2: Diferentes fases dos cristais líquidos bidimensionais, ilustradas pelas configurações típicas encontradas em simulações de Monte Carlo de elipses rígidas em duas dimensões, onde a temperatura decresce da esquerda para a direita. A fase isotrópica é desordenada, enquanto a fase nemática possui ordem orientacional apenas. A fase esmética correspondente a de temperaturas mais baixas possuindo ambas ordens translacional e orientacional. Figura adaptada de [9].

modelo dipolar contínuo, é renormalizado pelo efeito das flutuações sobre os momentos característicos das modulações. Essa renormalização se traduz na inclusão de interações quadrupolares efetivas que possuem a mesma simetria rotacional presente nos cristais líquidos. Uma análise do efeito das flutuações orientacionais desse Hamiltoniano efetivo leva a conclusão que o sistema sofre uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless de uma fase isotrópica para uma *fase nemática*, com apenas ordem orientacional das paredes de domínio.

Na segunda abordagem, apresentada na última seção do primeiro capítulo, elucidaremos o papel dos defeitos topológicos através de aproximações elásticas para o modelo dipolar contínuo, inicialmente desenvolvidas por Toner e Nelson (1981) [11] para cristais líquidos esméticos bidimensionais como uma extensão da teoria de Kosterlitz-Thouless para transições de fases mediadas por defeitos. Aqui, além da estabilidade da fase nemática com ordem orientacional de quase longo alcance, veremos como as anisotropias cristalinas podem estabilizar a temperaturas finitas uma *fase esmética*, com ordem translacional de quase longo alcance e ordem orientacional de longo alcance. Nessa parte daremos atenção especial aos resultados experimentais para filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular, onde se observam efeitos de anisotropia do substrato cristalino, assim como a estabilidade da fase esmética em temperaturas finitas [12].

No segundo capítulo introduzimos o método de simulação utilizado para estudar as propriedades de equilíbrio do modelo dipolar contínuo. A dinâmica natural para esse modelo fenomenológico de Landau Ginzburg é a dinâmica de Langevin, que é discretizada e integrada numericamente para estudar o efeito de temperatura sobre o estado fundamental de faixas. Após delinear algumas tecnicidades das simulações através de uma

análise do estado fundamental, apresentaremos resultados das simulações em altas temperaturas em que obtemos uma dependência da largura das faixas com a temperatura, comparando essa dependência com as observadas nos experimentos de filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular. Por fim, apresentaremos o principal resultado desta tese, em que obtivemos, por meio de simulações de Langevin em equilíbrio térmico, resultados apontando para a estabilidade de uma fase nemática com ordem orientacional apenas para temperaturas próximas a transição para a fase isotrópica. Nas conclusões faremos um apanhado geral dos resultados obtidos nas simulações, comparando-os com os experimentos e as análises teóricas apresentados no primeiro capítulo. Uma cópia da publicação de Nicolao e Stariolo (2007) [13], que incorpora parte dos resultados apresentados aqui, está colocada no apêndice.

# Capítulo 1

## Filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular

Nesse capítulo, serão apresentadas algumas propriedades gerais dos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular e alguns modelos relevantes para esse trabalho. Trata-se de um filme magnético no limite ultrafino (de espessura entre uma e dez monocamadas) de metal sobre metal, com forte anisotropia perpendicular, podendo ter composições em multicamadas de pequena espessura, e que exhibe padrões espaciais de magnetização, como faixas e bolhas. Apresentamos no que se segue algumas características importantes do sistema experimental, seguido de uma breve descrição microscópica do problema magnético, quando será introduzido o modelo utilizado nesse trabalho para estudar as fases moduladas dos filmes ultrafinos com forte anisotropia perpendicular: um Hamiltoniano efetivo de Landau-Ginzburg com interações competitivas. Propriedades físicas pertinentes para a introdução ao problema da ordem dos domínios magnéticos nesse sistema serão então ilustradas em uma sequência de aproximações para o Hamiltoniano efetivo: a solução em campo médio, a solução em campo médio auto-consistente (aproximação de Hartree), a solução em campo médio auto-consistente do Hamiltoniano efetivo renormalizado por um termo de interação quadrupolar, e por fim as aproximações elásticas para o modelo.

### 1.1 Sistema experimental e modelo microscópico

Filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular são sistemas epitaxiais aparentemente simples e fornecem uma fenomenologia rica e complexa, com uma intrincada interação entre a estrutura do filme e as propriedades magnéticas das camadas individuais dos filmes. O estudo das propriedades magnéticas em filmes ultrafinos começou no

início dos anos 70 com o desenvolvimento de técnicas de deposição por epitaxia por feixe molecular. Desde então, houve considerável desenvolvimento de pesquisas, possibilitando inúmeras aplicações tecnológicas [14]. Dependendo da sintonia fina entre seus ingredientes, as aplicações tecnológicas vão desde válvulas de spin e estruturas multicamadas direcionadas a sensores e dispositivos baseados em magnetorresistência gigante, até o desenvolvimento de novas mídias de armazenamento [2], que têm particular relação com este estudo. No âmbito de filmes magnéticos, cabe ressaltar, parte da fenomenologia básica de formação de padrões de magnetização alternada nos filmes ultrafinos com anisotropia perpendicular já foram estudadas em filmes e placas de maior espessura [1], em especial no desenvolvimento de memórias de bolhas magnéticas, que tiveram seu ápice de uso tecnológico nos anos 70. Dentre esses sistemas, os mais estudados são os filmes magnéticos de Granada [15, 16], em especial camadas monocristalinas de Granadas ferrimagnéticas crescidas em substrato de Granada de Gálio e Gadolínio ( $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ ), com espessuras da ordem de  $10\ \mu\text{m}$ . No entanto, o interesse particular desta tese é em filmes magnéticos ultrafinos com forte anisotropia perpendicular que formam padrões de magnetização para fora do plano do filme, e que tiveram crescente investigação teórica e experimental a partir do fim dos anos 80. Este é o caso dos filmes de metais sobre substratos de metais, como Fe sobre Cu e Co sobre Au [17], com espessuras variando de 1 a 10 monocamadas (1-10 ML).

Os domínios magnéticos nesses sistemas podem ser visualizados através de técnicas de microscopia eletrônica, como a microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização (SEMPA) e a microscopia eletrônica de fotoemissão (PEEM). Os padrões de magnetização observados apontam para fora do plano do filme e são constituídos de faixas (bolhas no caso de um campo externo aplicado perpendicularmente ao filme), com diferentes simetrias, dependendo da temperatura/espessura do filme (como vamos ver, a temperatura e a espessura do filme desempenham papéis semelhantes nas estruturas magnéticas). Além disso, observa-se que esses padrões surgem abaixo de uma região de altas temperaturas/espessuras onde a magnetização aponta paralelamente ao plano. Um exemplo de uma observação experimental pode ser visualizado na Fig. 1.1. Para entender os mecanismos por trás desses fenômenos de formação de padrão e reorientação dos momentos magnéticos, assim como a dependência com a temperatura/espessura, vamos analisar qualitativamente um modelo clássico mínimo constituído por variáveis de spin de Heisenberg.

## Modelo Microscópico

A magnetização dentro de cada domínio é devida ao acoplamento ferromagnético de troca ( $\mathcal{H}_{ex}$ ) que tende a alinhar momentos magnéticos vizinhos. A existência dos domínios é devida à energia dipolar ( $\mathcal{H}_{dip}$ ), por isso também chamada energia "desmagnetizante" (ou "magnetostática" por ser, a rigor, a verdadeira interação magnética entre spins,

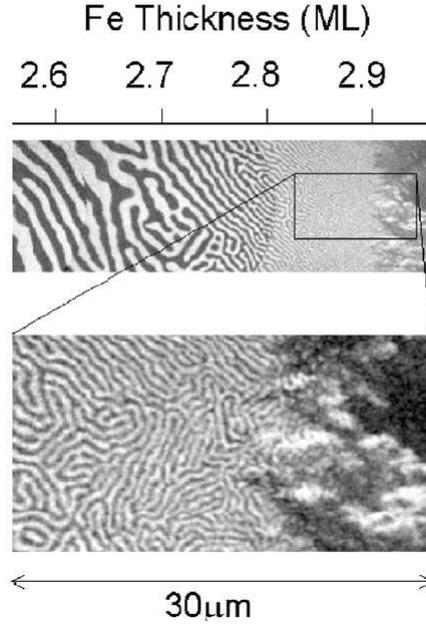


Figura 1.1: Imagem dos domínios de magnetização em um filme de Fe(2.7 ML)/Ni(5.4 ML)/Cu(001), feitas através de um microscópio eletrônico de fotoemissão (PEEM). A espessura, que desempenha um papel de temperatura efetiva em filmes ultrafinos com anisotropia perpendicular, cresce da esquerda para a direita. Os domínios de magnetização em forma de faixas apontam na direção perpendicular ao filme, onde o contraste entre branco e preto nas imagens corresponde a domínios com magnetização perpendicular oposta, e surgem na região de baixas espessuras (esquerda). Nesse caso, a largura da faixa foi medida e decresce exponencialmente com a espessura. Para espessuras grandes (direita) a magnetização passa a apontar paralelamente ao plano do filme. Figura adaptada de [18].

ou também "de anisotropia da forma" por sua minimização geralmente depender fortemente da forma da amostra). Finalmente, domínios são magnetizados em uma direção preferencial ditada pela energia de anisotropia de superfície ( $\mathcal{H}_{an}$ ). As escalas de energia típicas para filmes ultrafinos com anisotropia perpendicular de metais sobre metais é de  $\mathcal{H}_{ex} \simeq 300\text{K}$ ,  $\mathcal{H}_{dip} \simeq 2\text{K}$  [14] e  $\mathcal{H}_{an} \simeq 20\text{K}$  [19, 20].

Assim, a estrutura magnética do sistema depende da minimização da energia total:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_{dip} + \mathcal{H}_{an}. \quad (1.1)$$

Sendo assim, uma forma genérica para o hamiltoniano (1.1) em duas dimensões (uma monocamada) é feita tomando os momentos magnéticos como spins de Heisenberg de módulo unitário. Então, o primeiro termo

$$\mathcal{H}_{ex} = \frac{J}{2} \int d\vec{x} (\nabla \vec{S})^2, \quad (1.2)$$

é a interação de troca de Heisenberg na aproximação contínua, que favorece o alinhamento paralelo de spins vizinhos. O segundo termo

$$\mathcal{H}_{dip} = \mathcal{H}_{dip}^{(1)} + \mathcal{H}_{dip}^{(2)}, \quad (1.3)$$

é a energia dipolar, que pode ser dividida na parte rotacionalmente invariante

$$\mathcal{H}_{dip}^{(1)} = \frac{\Omega}{8\pi} \int \frac{d\vec{x}d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} \vec{S}(\vec{x}) \cdot \vec{S}(\vec{x}'), \quad (1.4)$$

e na parte anisotrópica

$$\mathcal{H}_{dip}^{(2)} = -\frac{3\Omega}{8\pi} \int \frac{d\vec{x}d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} (\vec{S}(\vec{x}) \cdot \vec{\nu})(\vec{S}(\vec{x}') \cdot \vec{\nu}), \quad (1.5)$$

onde  $\vec{\nu} \equiv (\vec{x} - \vec{x}')/|\vec{x} - \vec{x}'|$  é um vetor unitário ligando os dois spins e  $\Omega \propto g^2 \mu_B^2 > 0$  é a constante que fornece a intensidade da energia dipolar, onde  $g$  é o fator giromagnético e  $\mu_B$  o magneton de Bohr. O termo  $\mathcal{H}_{dip}^{(1)}$  é o acoplamento antiferromagnético de longo alcance, enquanto que  $\mathcal{H}_{dip}^{(2)}$  é uma anisotropia que favorece orientações paralelas ao plano. O terceiro termo,

$$\mathcal{H}_{an} = -\frac{K}{2} \int d\vec{x} S_z^2(\vec{x}), \quad (1.6)$$

é a energia anisotrópica superficial, onde a constante  $K$  é positiva, favorecendo a formação de domínios com magnetização para fora do plano. Através deste modelo pode-se observar dois tipos de competições entre as interações:

1. a que assegura a orientação da magnetização para fora do plano a baixas temperaturas/espessuras é a competição entre a anisotropia de superfície e a parte anisotrópica da interação dipolar. Dessa competição resulta uma transição de reorientação de spins (TRS): acima da temperatura/espessura de transição, o momento magnético é confinado ao plano da rede (e se torna equivalente a um modelo XY); abaixo dessa temperatura/espessura a componente perpendicular do momento magnético é finita;
2. abaixo da TRS, a interação de troca (ferromagnética, forte e de curto alcance) é frustrada pela parte isotrópica da interação dipolar (antiferromagnética, fraca e de longo alcance), o que leva à formação de padrões de faixas com magnetização para fora do plano. Esse é o regime de interesse dos estudos apresentados nesta tese.

Através desse modelo podemos ilustrar em termos gerais o comportamento da magnetização em filmes magnéticos com forte anisotropia perpendicular. A seguir vamos discutir algumas de suas propriedades, revisando resultados teóricos e experimentais a fim de caracterizar a fenomenologia básica desse sistema.

## 1. Transição de reorientação dos spins

Experimentalmente, o diagrama das diferentes fases magnéticas pode ser "visitado" variando a temperatura e/ou a espessura do filme. Considerando a variação dos parâmetros  $J, K$  e  $\Omega$  com a espessura  $D$  do filme, em temperatura  $T$  constante, podemos fazer as seguintes considerações: como os spins na direção vertical podem ser vistos como estritamente ligados, a interação de troca deve ser magnificada por um fator  $D$ . A interação dipolar recebe contribuição da interação entre dois blocos de spins separados a uma distância muito maior que a espessura do filme e deve escalar com o quadrado da espessura. No que concerne a passagem entre um estado de magnetização no plano para um fora do plano, a TRS ocorre quando a parte anisotrópica da interação dipolar tem a mesma magnitude da anisotropia perpendicular, que se mantém constante com a espessura devido à sua natureza de superfície [18, 21, 22].

O mesmo fenômeno de reorientação pode ser observado diminuindo a temperatura partindo de um estado paralelo ao plano, tal que os parâmetros  $(J, \Omega, K)$  sejam fortalecidos pela redução das flutuações térmicas - essa dependência pode ser obtida por uma análise de grupo de renormalização [23]. A TRS é o resultado de uma dependência mais forte com a temperatura da anisotropia perpendicular em relação ao acoplamento dipolar, assim que  $\Omega(T) > K(T)$  acima da TRS e  $K(T) > \Omega(T)$  abaixo da temperatura de TRS. Cabe lembrar que para filmes ultrafinos com anisotropia perpendicular, à temperatura zero  $K(0) > \Omega(0)$ .

Os domínios magnéticos estudados aqui são esperados à temperaturas (espessuras) *menores* que a da transição de reorientação. A natureza dessa transição é sensível à estrutura desses domínios - que dependem por sua vez do estado fundamental e do efeito das flutuações térmicas sobre ele [24]. Um diagrama de fases deste modelo de Heisenberg foi construído via simulações de Monte Carlo por Carubelli e colaboradores (2008) [22] e pode ser visualizado na figura 1.2.

## 2. Fases moduladas e o estado fundamental

Como mencionado anteriormente, a anisotropia superficial força a magnetização a estar orientada ao longo da direção perpendicular ao plano do filme, para temperaturas/espessuras suficientemente baixas, abaixo da TRS. Nesse caso, uma configuração de magnetização uniforme resulta em um valor grande para a energia dipolar (1.3). Essa energia é reduzida quando esse estado é quebrado em domínios de magnetização oposta, formando um padrão de faixas. No entanto, a inserção de domínios de magnetização oposta eleva a largura e, portanto, a energia das paredes de domínio (principalmente devido ao fato de que, nas paredes de domínio, spins vizinhos não são paralelos resultando num acréscimo da energia de troca). Esse balanço energético entre a energia de troca e

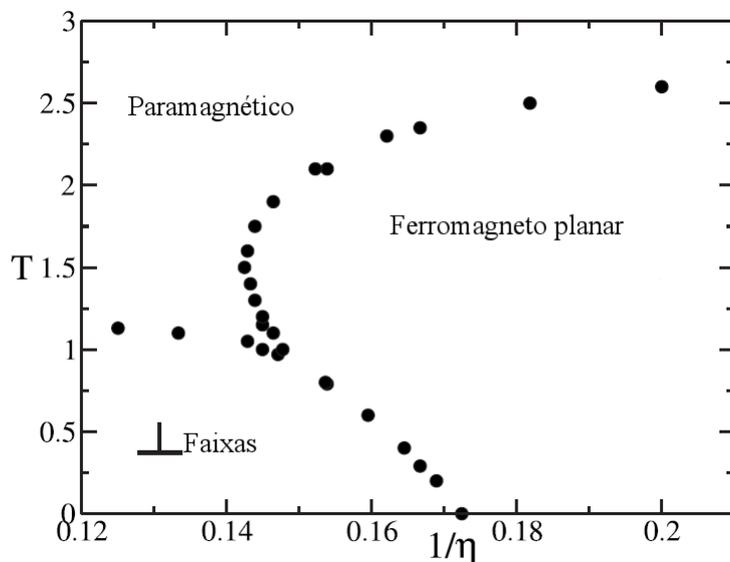


Figura 1.2: Diagrama de fases de temperatura versus o inverso da anisotropia superficial ( $\eta \equiv K/\Omega$ ), para um valor específico da força relativa entre as interações de troca e dipolar ( $J/\Omega = 3$ ). Os domínios de faixas com magnetização perpendicular ao plano estudados aqui são observados no regime de baixas temperaturas e forte anisotropia superficial, sendo que os resultados apresentados nesta tese equivalem ao limite  $\eta \rightarrow \infty$ , onde não observamos uma TRS. Figura adaptada de [22].

a dipolar é satisfeito otimizando a largura do domínio de faixa  $L$ , que depende essencialmente da razão entre  $J$  e  $\Omega$ , levando ao estado fundamental do sistema: o estado de faixas, que são domínios paralelos onde a magnetização para fora do plano alterna entre positiva e negativa. Para o caso em que a largura das faixas  $L$  é muito maior que a espessura do filme  $D$  (que é o caso de filmes ultrafinos com anisotropia perpendicular), Yafet e Gyorgy (1988) [21] determinaram que, para anisotropias perpendiculares acima de um valor crítico, o estado fundamental é o estado de faixas separadas por paredes de Bloch. Estas são paredes onde o momento magnético faz uma rotação paralela à direção dos domínios de faixas (ver Fig. 1.3).

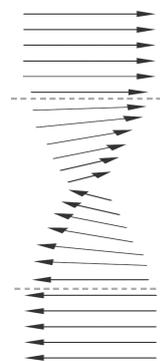


Figura 1.3: Parede de Bloch.

Experimentalmente, motivados pelo trabalho seminal de Yafet e Gyorgy (1988), esse estado de faixas abaixo da transição de reorientação foi apontado por Pappas, Kämper e Hopster (1990) [25] e confirmado por Allenspach e Bischof (1992) [26] em filmes de Fe com estrutura f.c.c. (cúbica de face centrada) sobre Cu(100).

Considerando o limite de alta anisotropia superficial ( $K \rightarrow \infty$ ) e variáveis de Ising, Czech e Villain (1989) [27] argumentaram que a configuração de domínios de xadrez teria energia mais baixa que a de faixas. Essa controvérsia foi resolvida por Kaplan e Gehring (1993) [28] e MacIsaac e colaboradores (1995) [29] que compararam as energias de

possíveis candidatos ao estado fundamental e concluíram a favor do padrão de faixas. Mais recentemente, ainda no caso Ising, o estado fundamental de faixas foi demonstrado ser o correto em bases matematicamente rigorosas por Giuliani, Lebowitz e Lieb (2006) [30].

Cabe ressaltar que em ambos casos, Ising e Heisenberg, a largura  $L$  das faixas a temperatura zero varia exponencialmente com a intensidade da interação dipolar em relação à interação de troca  $L \approx \exp(E_{dw}/\Omega)$ , onde o custo energético para uma parede de domínio é  $E_{dw} = 2J$  para o modelo de Ising e  $E_{dw} = 2\sqrt{J(K - \Omega)}$  para o modelo de Heisenberg. Uma característica interessante do estado de faixas, fruto de sua origem competitiva, é que sua largura depende da razão  $J/\Omega$ . Pode-se esperar, portanto, que a largura dos domínios de faixa varie com a temperatura/espessura do filme, dependendo de como as energias dipolar e de troca são influenciadas por esses parâmetros.

Experimentalmente, essa dependência da largura das faixas com a temperatura é na maioria das vezes observada, com raras exceções, embora sua forma funcional seja controversa [31]. Exemplos da dependência da largura de modulação com a espessura do filme e com a temperatura podem ser vistos nas figuras Fig. 1.1 e Fig. 1.4.

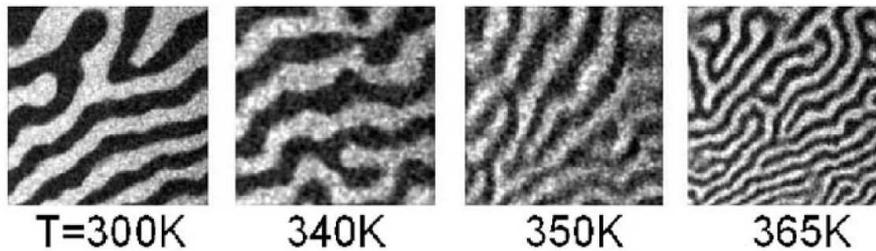


Figura 1.4: Dependência da largura das faixas com a temperatura em um filme de Fe(2.7 ML)/Ni(5.4 ML)/Cu(001). As imagens são de  $20 \mu m \times 20 \mu m$  e foram feitas através de um microscópio eletrônico de fotoemissão (PEEM). Figura adaptada de [18].

### Fusão das faixas (*stripe melting*)

Como podemos notar nas figuras Fig. 1.1 e Fig. 1.4, além do efeito da temperatura/espessura na largura das faixas, esses parâmetros modificam a maneira como as faixas estão dispostas. Esse efeito é o tema central desta tese. Podemos entender o estado fundamental como um arranjo paralelo de faixas. Entretanto, o efeito de temperatura leva esse arranjo a sofrer flutuações de diferentes tipos, até levar as faixas a se acomodarem em um padrão labiríntico. Os diferentes tipos de flutuações comportadas pelas faixas correspondem a diferentes tipos de ordem desses domínios, com quebras de simetrias características relacionadas a diferentes fases termodinâmicas. Nas seções seguintes deste capítulo iremos descrever mais profundamente os principais aspectos envolvidos na fusão (ou derretimento) das faixas. Por ora vamos apenas esboçar algumas características da estrutura de domínios de faixas e revisar os resultados experimentais no sentido de

como esses podem se ordenar. Para caracterizar as possíveis fases é necessário primeiro compreender as simetrias envolvidas no problema.

Como apontado anteriormente, a competição entre as interações de troca e dipolar leva, a temperatura e campo nulos, o sistema a ter um estado fundamental de faixas. Essa rede de paredes de domínio (ver Fig. 1.5) pode ser vista como um *sólido bidimensional* caracterizado por:

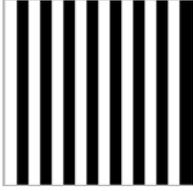


Figura 1.5: estado fundamental de faixas.

- ordem orientacional - é invariante sob rotações de  $\pm\pi$ .
- ordem translacional - é invariante não só sob translações de comprimentos de onda perpendiculares às paredes, como também sob quaisquer translações paralelas às paredes. Nesse sentido, o sistema tem simetrias tipo líquido em uma direção (a paralela) e tipo sólido na outra (a perpendicular). Podemos denominar essa ordem como uma *ordem translacional anisotrópica* [11].

Conhecendo os diferentes tipos de ordem do estado fundamental, duas questões que se levantam sobre as possíveis fases do sistema é se a quebra das simetrias se dá na mesma temperatura ou cada qual em temperaturas distintas, e como se dá a quebra das simetrias, isto é, qual o mecanismo e o tipo de transição associado. Essas questões serão discutidas ao longo da tese. No que diz respeito à ordem translacional, que parece ser a ordem mais suscetível à flutuações térmicas, experimentalmente foram observadas diferentes excitações com respeito ao estado fundamental, como podemos ver na Fig. 1.6. De fato, os tipos de ordem dessas faixas a temperatura zero são um caso particular do ordenamento em duas dimensões de um cristal unidimensional. Como apontado por Landau e Peierls [32], flutuações térmicas destroem a ordem translacional de longo alcance nesses sistemas, analogamente aos cristais líquidos esméticos em duas dimensões. Na seção 1.6 iremos mostrar que a fase de faixas em baixas temperaturas é uma *fase esmética* caracterizada por duas causas essenciais para a perda da ordem translacional: a primeira são deslocamentos na posição das paredes de domínio (sinuosidades ou ondulações); a segunda é a proliferação de defeitos topológicos chamados *discordâncias*, que são inserções de faixas semi-infinitas em outras faixas (ver Fig. 1.6.A).

Embora as evidências sejam claras de que a baixas temperaturas a fase esmética seja observada em filmes ultrafinos magnéticos com anisotropia perpendicular, diferentes tipos de ordens e defeitos são observados (ver Fig. 1.6.B-E). Principalmente, a sequência de fases observada entre as fases esmética e a desordenada (ver Fig. 1.7.a e Fig. 1.7.b) ainda é controversa e carecem de caracterizações quantitativas. Um exemplo intrigante é o de Portmann e colaboradores [12], que observaram uma fase reentrante a altas temperaturas de menor simetria, pouco abaixo da temperatura de transição a um estado

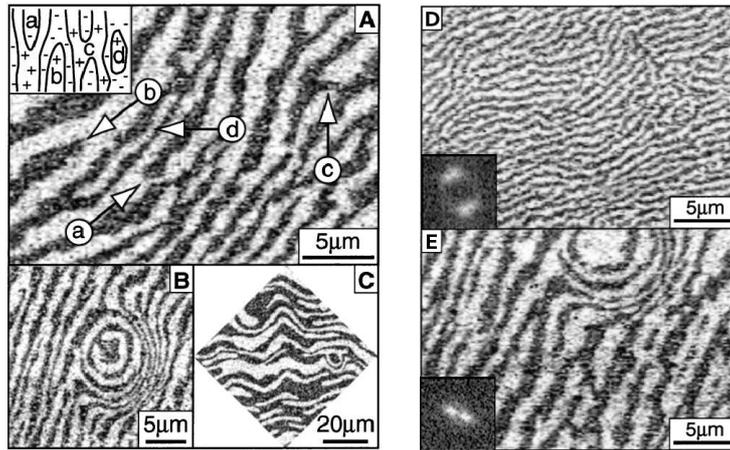


Figura 1.6: Imagens de um filme de Fe fcc crescido sobre Cu(100), com espessura de  $2.6 \pm 0.6$  camadas atômicas, feitas pela técnica de microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização (SEMPA). A esquerda, em (A), diferentes defeitos topológicos translacionais, as discordâncias, característicos da fase esmética. Em (B) um defeito circular, do tipo alvo. Em (C), defeitos do tipo "chevron". Em (D) e (E) diferentes estruturas de faixas a temperatura ambiente e, em detalhe, os correspondentes fatores de estrutura. Figuras adaptadas de [33].

paramagnético (ver Fig. 1.7.c-f). Aumentando a temperatura efetiva, essa fase ordenada surge a partir de uma fase desordenada com padrões labirínticos e portanto com maior simetria. São raros os casos em que a simetria do sistema é reduzida com a temperatura, e para tanto a simetria reduzida da fase reentrante deve ser balanceada por algum tipo de desordem em outro aspecto tal que a entropia não diminua com a temperatura [12]. Todavia, uma explicação para esse fenômeno de reentrância ainda não foi formulada.

Ainda assim, as imagens obtidas mostram um complexo diagrama de fases moduladas com estruturas de diferentes simetrias, onde todavia seus constituintes básicos ainda são faixas. Essas estruturas parecem estar em sintonia com uma vasta classe de problemas de baixa dimensão, onde não existe uma teoria estrita para os tipos de fases e de transições presentes. O que procuramos evidenciar nesta tese é que, além da fase esmética observada experimentalmente a baixas temperaturas, é provável que entre essa fase e a fase labiríntica ou desordenada exista uma fase intermediária, de ordem orientacional apenas, denominada *fase nemática*. Essa questão, assim como a existência da fase esmética, também é um exemplo do problema da fusão de sólidos bidimensionais [34]: enquanto alguns modelos evidenciam o papel dos defeitos topológicos e predizem a ocorrência de estados intermediários e transições de fase contínuas, outros sugerem uma transição de primeira ordem direta para a fase desordenada de altas temperaturas. Algumas teorias relevantes para o caso da fusão das faixas, assim como sua aplicabilidade em filmes ultrafinos com anisotropia perpendicular, são revisadas nas próximas seções, que trazem a problemática

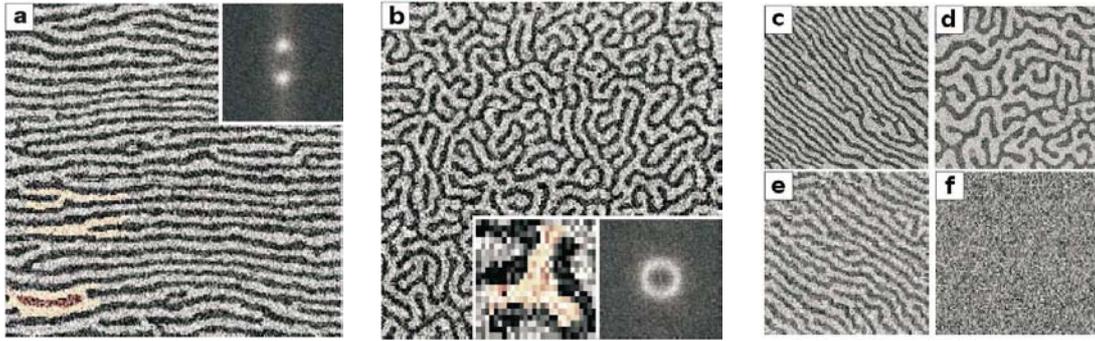


Figura 1.7: **a.** fase esmética de baixas temperaturas, com  $T = 293K$  e espessura de 2.44 camadas atômicas (ML), apresentando diversas discordâncias. Em detalhe o fator de estrutura (espectro de potências de Fourier) indicando que as faixas possuem ordem orientacional local; **b.** fase desordenada para a mesma temperatura, porém espessura de 1.97 ML. Em detalhe um defeito topológico orientacional das faixas e o fator de estrutura isotrópico; **c-f.** transição inversa: a temperatura efetiva aumenta de c-f, em uma sequência de padrão de faixas, padrão labiríntico, novamente o padrão de faixas e a fase paramagnética. Figuras adaptadas de [12].

das fases de equilíbrio e as transições de fase como o principal tema desta tese.

As excitações e os diferentes tipos de ordem dos domínios de faixas em filmes finos discutidos acima não são facilmente tratáveis através do modelo microscópico de Heisenberg introduzido nesta seção. Além disso, o problema da sequência das fases moduladas surge abaixo da TRS. Nesse regime a componente dominante é a perpendicular ao plano e as paredes de Bloch separando as faixas são muito mais estreitas que a largura das faixas [24]. Nesse caso um modelo uniaxial, com variáveis de Ising, passa a ser um bom candidato para estudar as propriedades estatísticas das fases moduladas. Sendo assim, vamos nos restringir a estudar o limite de alta anisotropia superficial, o limite de Ising, introduzindo na próxima seção o modelo escalar no qual se fundamenta a pesquisa apresentada aqui.

## 1.2 Modelo dipolar contínuo

Aqui introduzimos o modelo dipolar contínuo, um Hamiltoniano ferromagnético com simetria uniaxial de Landau-Ginzburg frustrado pela interação dipolar antiferromagnética de longo alcance. Como será evidenciado ao longo do capítulo, esse modelo captura a fenomenologia básica da formação de padrões em filmes ultrafinos magnéticos abaixo da TRS. Esse modelo não é o Hamiltoniano microscópico propriamente dito, mas sim um funcional efetivo, resultante da expansão em potências da magnetização  $\phi$ , que fornece a energia do microestado  $\phi(\mathbf{x})$  em unidades da energia térmica  $T$  (usaremos  $k_B = 1$ ). Ele pode ser escrito como a soma do Hamiltoniano de troca e a interação dipolar na forma:

$$H[\phi] = H_{troca}[\phi] + H_{dipolar}[\phi]. \quad (1.7)$$

O Hamiltoniano de troca corresponde à versão *coarse grained* do modelo microscópico de Ising:

$$H_{Ising} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j. \quad (1.8)$$

A forma funcional de sua versão *coarse grained* pode ser derivada pela transformação de Hubbard-Stratonovich [35] na função de partição. De acordo com a definição do *coarse grain*, como inicialmente proposta por Gibbs, essa transformação corresponde a um particionamento do espaço de coordenadas do sistema, em pequenas células, ou grãos, de volume pequeno porém finito e que agrupam, sob um mesmo rótulo, um conjunto de microestados "próximos" ou semelhantes - no sentido de correspondência a um mesmo macroestado. Assim a distribuição de probabilidades dos estados do sistema é tomada pela sua versão *coarse-grained*, que dentro de uma precisão finita corresponde aos mesmos microestados. O funcional resultante é basicamente a energia livre de Landau para o ferromagneto, que por sua vez tem correspondência direta com a expansão da magnetização na energia livre na aproximação de Bragg-Williams em torno da transição [36], mantendo os termos mínimos requeridos pela simetria para descrever a transição. O funcional de Landau obtido pela transformação de Hubbard-Stratonovich é:

$$H_{troca}[\phi] = \int d^2\mathbf{x} \left[ \frac{J}{2} (\nabla\phi(\mathbf{x}))^2 + \frac{(T - T_c)}{2a^2} \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{T_c}{12a^2} \phi^4(\mathbf{x}) \right], \quad (1.9)$$

onde  $T_c = zJ$  em duas dimensões ( $z$  é o número de primeiros vizinhos na rede subjacente do modelo microscópico e para o caso da rede quadrada  $z = 4$ ), e  $a$  é o tamanho linear da célula do *coarse graining* - que é associado a uma frequência de corte ultravioleta necessária para convergência das integrais. Aqui  $\phi(\mathbf{x})$  é a magnetização *coarse grained*, correspondente a média térmica local de um número muito grande de spins de Ising situados em uma célula centrada em  $\mathbf{x}$ , ressaltando o caráter mesoscópico do "Hamiltoniano efetivo". O termo gradiente favorece energeticamente configurações de magnetização homogênea. O termo dipolar tem a forma usual:

$$H_{dipolar}[\phi] = \frac{\Omega}{2} \int d^2\mathbf{x} \int d^2\mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}') J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \phi(\mathbf{x}), \quad (1.10)$$

onde a interação dipolar repulsiva é:

$$J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) = 1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3, \quad (1.11)$$

em duas dimensões, tomando uma aproximação de ordem zero para a interação entre duas células magnetizadas. Essa aproximação consiste em tomar a magnetização de uma célula não como uma distribuição contínua mas sim como pontual, sendo que a correção em próxima ordem decai na quinta potência da distância [37]. Essa aproximação é

natural, dentro do espírito das classes de universalidade, já que estamos interessados em comportamentos a longas distâncias. Para escrever agora o Hamiltoniano completo (1.7), é conveniente reescalar o campo  $\phi \rightarrow J^{-1/2}\phi$ , tal que o termo do gradiente seja  $\frac{1}{2}$ . Sendo assim ele pode ser escrito como:

$$H[\phi] = \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{x} \left[ (\nabla\phi(\mathbf{x}))^2 + r_0\phi^2(\mathbf{x}) + \frac{u}{2}\phi^4(\mathbf{x}) + \frac{1}{\delta} \int d^2\mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}') J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \phi(\mathbf{x}) \right], \quad (1.12)$$

onde agora a constante  $\delta$  descreve a intensidade relativa entre as interações de troca e dipolar e os parâmetros  $r_0 = (T - T_c)/2a^2J$  e  $u = T_c/12a^2J^2$  fornecem a forma do potencial local. É importante notar que o Hamiltoniano total é isotrópico, isto é, as interações competitivas são invariantes frente a rotações espaciais. Embora aqui estejamos denominando esse funcional como um Hamiltoniano, como de fato comumente se faz na literatura de mecânica estatística e fenômenos críticos, ele não é uma função de variáveis para as quais foram definidas relações de comutação, etc. É justamente um "Hamiltoniano efetivo", no sentido em que nele já foi realizado um "traço parcial" dos graus de liberdade microscópicos.

Na teoria clássica de Landau e Ginzburg para fenômenos críticos esse funcional é a energia livre do sistema. Foi no advento dessa teoria que Landau introduziu seu conceito de *parâmetro de ordem*. Embora desconhecendo os fenômenos microscópicos, como historicamente foi o caso do Hélio superfluido, reconheceu que esses devem ter algumas propriedades gerais, como sua localidade no espaço de coordenadas e simetrias, e essas propriedades governam a maior parte do comportamento característico em distâncias maiores que as atômicas. Tradicionalmente a mecânica estatística liga diretamente o nível microscópico dos núcleos e átomos (em escalas de  $10^{-13}$  a  $10^{-8}$  cm) com o nível macroscópico (de milímetros a metros). O parâmetro de ordem, como uma quantidade dinâmica e flutuante, intervém em escalas intermediárias ou mesoscópicas caracterizadas por escalas de, por exemplo,  $10^{-6}$  a  $10^{-3}$  cm. Do conceito de parâmetro de ordem de Landau, e da teoria de Landau e Ginzburg para transições de fase, iniciou-se uma teoria sistemática de campos efetiva na mecânica estatística, que culminou na elaboração da teoria do grupo de renormalização e, no que concerne essa tese, de um Hamiltoniano efetivo de Landau-Ginzburg-Wilson que conserva as propriedades críticas, como as classes de universalidade e as quebras de simetrias, de um modelo mais microscópico [38]. Sendo assim, tomamos o funcional de Landau-Ginzburg para a energia livre do sistema e o tratamos como a energia para uma particular configuração local do parâmetro de ordem, e, ao invés de considerarmos apenas a energia mínima, permitimos excitações dessas configurações de acordo com seu peso estatístico. Os estados do sistema podem ser especificados pelo campo  $\phi(\mathbf{x})$  e têm energia efetiva  $H[\phi]$ . A função de partição é então uma integral de caminho, uma integral funcional, sobre todos os valores possíveis de  $\phi(\mathbf{x})$  em todas posições  $\mathbf{x}$ :

$$Z = \int \mathcal{D}\phi(\mathbf{x}) e^{-\beta H[\phi]}. \quad (1.13)$$

A função de partição (1.13) não pode ser calculada exatamente porque ela não é gaussiana, devido o termo quártico  $\phi^4$  em (1.12). O tratamento perturbativo sistemático através de expansões em séries do coeficiente  $u$  do termo  $\phi^4$  concerne à formulação diagramática da teoria do grupo de renormalização. Esse tipo de tratamento não será trabalhado aqui, embora alguns de seus conceitos e aproximações relacionadas a ele serão discutidos nas seções 1.4 e 1.5. Na próxima seção será discutida a aproximação de campo médio, que embora seja uma aproximação muito simples para a função de partição (1.13), delinea as características básicas do modelo e suas particularidades frente ao modelo sem frustração.

### 1.3 Campo médio

Nesta seção investigamos a aproximação mais crua para o modelo, que consiste em fazer uma aproximação de ponto de sela, tomando apenas a contribuição dominante do estado de menor energia  $\langle \phi_0 \rangle$  no cômputo da integral de caminho na função de partição (1.13):

$$Z = e^{-\beta H[\phi_0]} \rightarrow F = -T \ln Z = H[\phi_0], \quad (1.14)$$

recaindo na energia livre de Landau. Uma análise semelhante à apresentada aqui, embora para filmes de espessura muito maior que a largura das faixas, foi feita por Garel e Doniach (1982) [39] e Sornette (1987) [40] utilizando a mesma abordagem de Landau para o campo médio. Antes de seguirmos adiante para minimizar  $F$ , é conveniente definir as transformadas de Fourier do campo  $\phi$ :

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (1.15)$$

$$\phi(\mathbf{k}) = \int d^2\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad (1.16)$$

assumindo que o sistema está contido numa área  $L^2$  com condições de contorno periódicas, tal que os vetores de onda assumem valores  $k_i = 2\pi n_i/L$ , com  $i = 1, 2$  sendo as componentes cartesianas e  $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Sendo assim, a representação do Hamiltoniano (1.12) no espaço de momentos é:

$$H[\phi] = \frac{1}{2L^2} \sum_{\mathbf{k}} A(k) \phi(\mathbf{k}) \phi(-\mathbf{k}) + \frac{u}{4L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \phi(\mathbf{k}_1) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k}_3) \phi(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3), \quad (1.17)$$

em que a competição entre as interações está unicamente expressa pela função  $A(k)$ , o espectro de flutuações:

$$A(k) = r_0 + k^2 + \frac{J(k)}{\delta}, \quad (1.18)$$

e  $J(k)$  é a transformada de Fourier da interação dipolar. Essa função, em série de potências até segunda ordem em  $k$  tem a forma  $J(k) \simeq J(0) - 2\pi k + \frac{1}{2}a\pi^2 k^2$ , onde  $a$  é a constante de

rede e  $J(0) \simeq 9.05/a$  para condições de contorno periódicas e  $J(0) = 2\pi/a$  para condições de contorno livres, caracterizando o caráter de longo alcance da interação. Podemos reescrever o espectro de flutuações como:

$$A(k) = r_0 + A_0 + (k - k_m)^2, \quad (1.19)$$

onde  $k_m = \pi/\delta$  e  $A_0 = J(0) k_m/\pi - k_m^2$ , considerando por simplicidade apenas dependência linear em  $k$  na interação dipolar. Aqui fica evidente que a competição introduz um novo comprimento característico que depende da intensidade relativa entre as interações (ver figura 1.8).

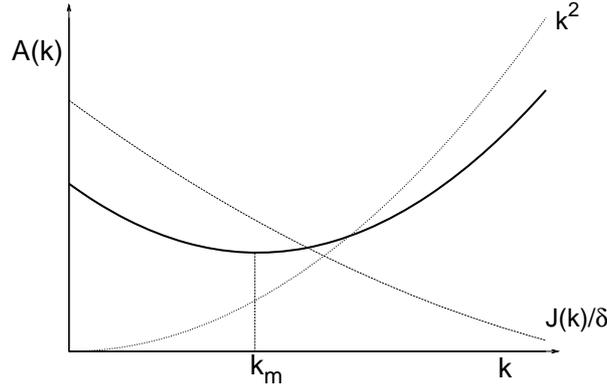


Figura 1.8: Ilustração do espectro de flutuações  $A(k)$  (graficado em linha sólida) com um mínimo em um vetor de ondas  $k_m$  diferente de zero, como resultado da competição entre as interações de curto  $k^2$  e longo alcance  $J(k)/\delta$  (em linhas tracejadas).

Com a representação do Hamiltoniano no espaço de Fourier, podemos procurar pela solução  $\phi_0$  que minimiza a energia livre de Landau:

$$\frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{x})} = 0 = -\nabla^2 \phi(\mathbf{x}) + r_0 \phi(\mathbf{x}) + u \phi^3(\mathbf{x}) + \frac{1}{\delta} \int d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}') J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|), \quad (1.20)$$

ou no espaço de Fourier:

$$\frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(-\mathbf{k})} = 0 = A(k) \phi(\mathbf{k}) + \frac{u}{L^4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \phi(\mathbf{k}_1) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2). \quad (1.21)$$

Encontrar uma solução para as equações acima não é uma tarefa fácil. O que fazemos é propor uma forma da solução, que esperamos ser periódica no espaço com um comprimento de modulação característico:

$$\phi_0(\mathbf{x}) = m_0 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}) \quad (1.22)$$

$$\phi_0(\mathbf{k}) = m_0 \frac{L^2}{2} (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0} + \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}_0}), \quad (1.23)$$

caracterizando uma fase modulada. Substituindo na equação (1.21), chegamos nas soluções para a amplitude:

$$m_0 = \begin{cases} 0 & \text{para } A(k_0) > 0 \\ \pm \sqrt{-\frac{4}{3u}A(k_0)} & \text{para } A(k_0) < 0. \end{cases} \quad (1.24)$$

O vetor de onda característico é determinado pela minimização da energia livre com respeito a  $k_0$ . Podemos escrever a energia livre em qualquer de seus pontos extremos através das equações (1.17) e (1.21) como:

$$H[\phi] = \frac{1}{4L^2} \sum_{\mathbf{k}} A(k) |\phi(\mathbf{k})|^2, \quad (1.25)$$

substituindo a solução  $\phi_0$  (1.23) com amplitude  $m_0$  dada pela equação (1.24) nessa expressão obtemos

$$\frac{H[\phi_0]}{L^2} = -\frac{A^2(k_0)}{6u}. \quad (1.26)$$

Minimizando essa expressão com respeito a  $k_0$ , obtemos que o vetor característico da modulação corresponde ao mínimo do espectro de flutuações:

$$k_0 = k_m. \quad (1.27)$$

Uma característica notável dessa solução, embora ilustre muito bem como as interações competitivas ocasionam a fase modulada, é que o vetor de onda característico não depende da temperatura. Isto porque supomos uma solução modo único para o mínimo de energia livre do sistema. Essa aproximação deve ser boa na vizinhança da transição entre o estado desordenado e a fase modulada, já que a transição acontece quando  $A(k_m)$  troca de sinal e como o mínimo do espectro de flutuações é em  $k_m$ , esse modo deve ser o primeiro a se tornar estável. Para temperaturas abaixo da transição devemos incluir a contribuição de harmônicos ímpares [41, 42] para obter uma dependência da largura da faixa com a temperatura. Esse caso será analisado ao final desta seção.

Inserindo a solução modo único  $\phi_0$  da equação (1.23) na energia livre (1.17) obtemos a mesma forma funcional da energia livre do ferromagneto:

$$\frac{2}{L^2} H[\phi_0] = \frac{1}{2} A(k_0) m_0^2 + \frac{3u}{16} m_0^4, \quad (1.28)$$

levando à tradicional forma de poço duplo abaixo da temperatura de transição (ver Fig. 1.9). A temperatura de transição sofre um pequeno ajuste devido à presença da interação dipolar, e é dada pela condição  $A(k_0, T_{k_0}) = 0$ , substituindo os valores da força da interação dipolar e de troca nos parâmetros  $r_0$  e  $\delta$ , o que leva a um pequeno acréscimo à temperatura de Curie:

$$T_{k_0} = T_c + 2a^2 J(0) \Omega - 2a^2 \pi^2 \frac{\Omega^2}{J}, \quad (1.29)$$

Sendo assim, a abordagem de campo médio prevê uma transição de segunda ordem entre a fase desordenada e a fase modulada, tal qual a observada na aproximação de campo

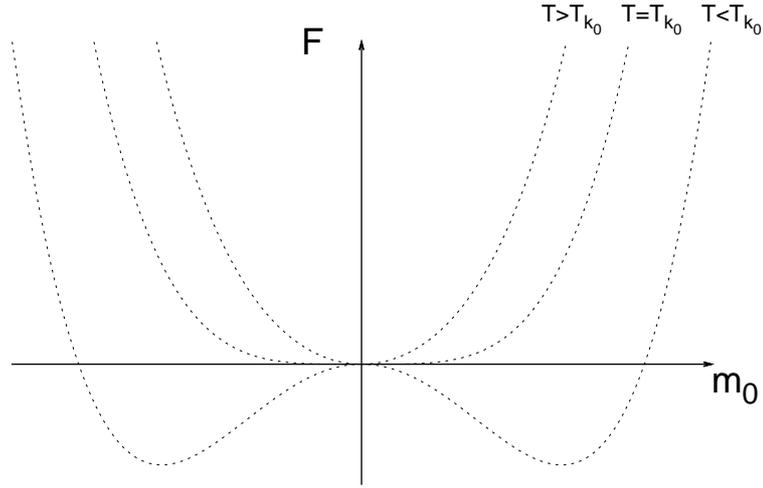


Figura 1.9: Ilustração do perfil da energia livre  $F$  (1.39) em função da amplitude  $m_0$  do parâmetro de ordem, com a diminuição da temperatura do sistema através da temperatura de transição da fase modulada  $T_{k_0}$ .

médio do modelo  $\phi^4$  sem a interação dipolar. A seguir analisaremos como o vetor característico  $k_0$  é modificado pela inclusão de um harmônico ímpar na solução de modo único. Esse tratamento não modifica a natureza da transição, entretanto permite observar a dependência da largura dos domínios de faixas com a temperatura próximo à temperatura de Curie.

### Solução modulada com um harmônico ímpar

Supondo ainda que estamos na vizinhança da temperatura de Curie, vamos analisar o caso da inclusão do terceiro harmônico na solução de modo único:

$$\phi_0(\mathbf{x}) = m_0 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}) + m_1 \cos(3\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}), \quad (1.30)$$

$$\phi_0(\mathbf{k}) = m_0 \frac{L^2}{2} (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0} + \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}_0}) + m_1 \frac{L^2}{2} (\delta_{\mathbf{k}, 3\mathbf{k}_0} + \delta_{\mathbf{k}, -3\mathbf{k}_0}). \quad (1.31)$$

O terceiro harmônico deve ser o primeiro modo a contribuir para a solução de faixas, já que harmônicos pares podem ser descartados ao requerer que a solução de faixas deva ser periódica, ou seja, que a magnetização separada por uma distância  $\pi/k_0$  deve diferir apenas por um fator  $-1$ . Substituindo a solução com a inclusão do terceiro harmônico (1.31) na equação de estado (1.21) chegamos a um sistema de duas equações, uma para  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  e outra para  $\mathbf{k} = 3\mathbf{k}_0$ :

$$-\frac{4}{3u} m_0 A(k_0) = m_0^3 + m_0^2 m_1 + 2m_0 m_1^2 \quad (1.32)$$

$$-\frac{4}{u} m_1 A(3k_0) = m_0^3 + 6m_0^2 m_1 + 3m_1^3. \quad (1.33)$$

A solução para a primeira equação, além da solução paramagnética é:

$$m_0 = -\frac{m_1}{2} \left( 1 \pm \sqrt{-7 - \frac{16A(k_0)}{3um_1^2}} \right), \quad (1.34)$$

onde faremos uma aproximação razoável para a relação entre as amplitudes. Já que estamos trabalhando na vizinhança da transição, o modo principal deve ter uma amplitude muito maior que seu harmônico:  $m_0 \gg m_1$ , o que na expressão anterior se traduz aproximadamente em:

$$-\frac{2A(k_0)}{3u} \gg m_1^2, \quad (1.35)$$

e leva a reescrever a solução para a amplitude do modo principal como

$$m_0 \simeq \sqrt{-\frac{4A(k_0)}{3u}} - \frac{m_1}{2}. \quad (1.36)$$

Desprezando termos de ordem mais altas em  $m_1/m_0$  na equação (1.33), obtemos que a amplitude do terceiro harmônico deve ser aproximadamente:

$$m_1 \simeq \frac{A(k_0)}{3A(3k_0)} \sqrt{-\frac{4A(k_0)}{3u}}, \quad (1.37)$$

e então obtemos na expressão para a amplitude  $m_0$  (1.36) a mesma solução de modo único (1.24), porém com uma pequena correção:

$$m_0 \simeq \sqrt{-\frac{4A(k_0)}{3u}} \left[ 1 - \frac{A(k_0)}{6A(3k_0)} \right]. \quad (1.38)$$

onde a condição para a aproximação  $m_0 \gg m_1$  basicamente se traduz na relação entre os espectros de flutuação  $A(k_0) \ll 3A(3k_0)$ . Para procurar pelo vetor de onda característico  $k_0$  que minimiza a energia do sistema, substituímos a solução (1.31) na forma da energia livre em um mínimo (1.25) para obtermos:

$$H[\phi] = \frac{L^2}{8} (m_0^2 A(k_0) + m_1^2 A(3k_0)) = -\frac{L^2}{6u} A^2(k_0) \left[ 1 - \frac{2A(k_0)}{9A(3k_0)} \right], \quad (1.39)$$

onde desconsideramos as correções de ordem  $O(A^2(k_0)/A^2(3k_0))$ . Derivando essa expressão em relação a  $k_0$  e desconsiderando as soluções para as quais a energia do sistema tem um máximo em  $H = 0$ , que correspondem às soluções de  $A(k_0) = 0$ , obtemos a seguinte expressão para o vetor de onda característico:

$$\frac{\partial A(k_0)}{\partial k_0} [3A(3k_0) - A(k_0)] + \frac{A^2(k_0)}{3A(3k_0)} \frac{\partial A(3k_0)}{\partial k_0} = 0. \quad (1.40)$$

Para solucionar essa equação faremos uma série de suposições razoáveis. A primeira é supor uma forma mais geral para o espectro de flutuações em uma aproximação parabólica, assim como a expressão analisada anteriormente na equação (1.19), dada por:

$$A(k) = r_0 + a_2(k - k_m)^2 \quad (1.41)$$

onde  $a_2 = \frac{1}{2} \frac{dA(k)}{dk} \Big|_{k=k_m}$ . Ao substituírmos essa forma do espectro de flutuações na equação (1.40) obtemos uma equação de ordem quártupla para  $k_0$ . A fim de simplificarmos essa expressão, dentro do espírito da aproximação para a vizinhança da transição, supomos que o vetor de onda característico é levemente modificado do valor em campo médio no caso modo único dado pela equação (1.27) por uma correção pequena dada por:

$$k_0 = k_m - \epsilon. \quad (1.42)$$

Os passos que se seguem foram obtidos utilizando as facilidades do aplicativo de álgebra computacional Maple. Substituindo a forma de  $A(k)$  dada pela equação (1.41) na equação para  $k_0$  (1.40) obtemos uma equação de quinta ordem para  $k_0$ . Podemos ainda usar a forma dada pela equação (1.42) e expandir essa equação em séries de potência de  $\epsilon$ . Mantendo essa expansão em primeira ordem em  $\epsilon$ , obtemos uma equação linear para  $\epsilon$  cuja solução depende dos parâmetros  $r_0$ ,  $k_m$  e  $a_2$ . O resultado obtido é ainda muito complicado, mas pode ser simplificado supondo a proximidade à transição, tal que expandimos a expressão para  $\epsilon$  em séries de potências de  $r_0$  e obtivemos:

$$k_0 = k_m - \frac{r_0^2}{6a_2^2 k_m^3}. \quad (1.43)$$

A validade para a expansão em séries de potências de  $r_0$  na solução para  $\epsilon$ , fazendo uma comparação com o termo seguinte da expansão, é de que  $-r_0 \ll \frac{6}{5} k_m^2 a_2$ . Para fins de validar essa aproximação para  $\epsilon$ , podemos comparar essa condição com a aproximação inicial  $m_0 \gg m_1$ , ou equivalentemente  $A(k_0) \ll 3A(3k_0)$ . Substituindo as expressões (1.41) e (1.43) nessa condição obtemos  $-r_0 \ll 3k_m^2 a_2$ , isto é, a aproximação para  $\epsilon$  está em acordo com nossa aproximação  $m_0 \gg m_1$ . Nesse nível de aproximação a temperatura de transição  $T_{k_0}$  não sofre alterações pela inclusão do terceiro harmônico.

Esse resultado em campo médio, que prediz uma dependência quadrática do vetor de onda característico com a temperatura, foi observado com boa precisão em filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular de Fe sobre Cu(100) por Portmann e colaboradores (2006) [43]. No entanto, outros resultados experimentais sugerem um cenário controverso para a dependência de  $k_0$  com a temperatura [31]. Por exemplo, Won e colaboradores (2005) [18] observaram em filmes de Fe sobre Ni sobre Cu(001) uma dependência exponencial do comprimento de modulação tanto com a temperatura, como com a espessura do filme. Esse resultado está em acordo com a dependência exponencial da largura das faixas no estado fundamental e em como as constantes de interação ( $J$ ,  $K$  e  $\Omega$  no caso do modelo de Heisenberg) são renormalizadas pelo efeito da temperatura/espessura (ver seção 1.1). No próximo capítulo apresentaremos resultados que corroboram a dependência quadrática do vetor de onda  $k_0$  com a temperatura obtida pela aproximação em campo médio (1.43).

A aproximação de campo médio claramente despreza as flutuações do parâmetro de ordem  $\delta\phi = \phi - \langle\phi\rangle$  ao tomar apenas o valor médio para computar a função de partição.

Por exemplo, no modelo  $\phi^4$  (sem interações competitivas), pode-se usar as técnicas do grupo de renormalização para mostrar que a transição continua sendo de segunda ordem, porém os expoentes críticos que a caracterizam sofrem alterações em relação aos valores obtidos por campo médio, quando a dimensão do sistema é menor do que quatro. Para o caso da inclusão da interação dipolar, o espectro de flutuações em (1.19) é bastante diferente do modelo  $\phi^4$ . Enquanto nesse último as excitações de mais baixa energia se dão em torno do ponto  $k = 0$ , com a inclusão da interação dipolar essas excitações se dão em torno do círculo  $|\mathbf{k}| = k_m$  (ver Fig. 1.10). Assim, há relativamente mais modos de excitação no modelo dipolar contínuo, sugerindo que as flutuações devem ter um papel muito mais dramático do que no modelo  $\phi^4$ . Nas duas próximas seções vamos elucidar o papel das flutuações, principalmente em como seu efeito pode levar à inclusão de diferentes termos efetivos na energia livre de Landau e como esses modificam o caráter da transição de segunda ordem.

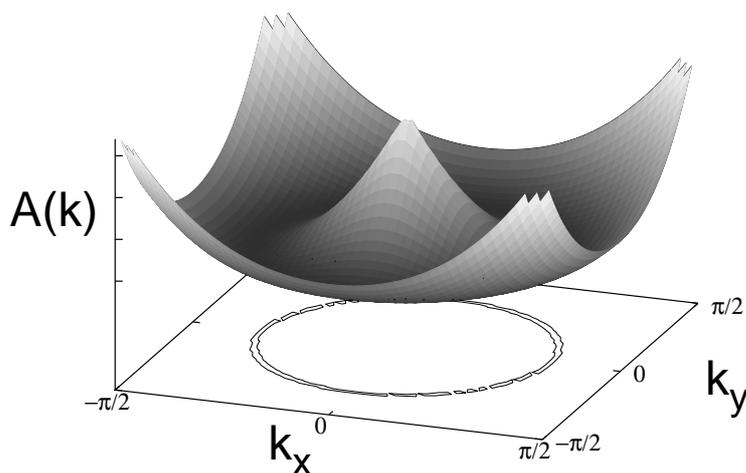


Figura 1.10: Ilustração do espectro de flutuações em duas dimensões. Essa função é isotrópica e a superfície de mínima energia é o círculo  $|\mathbf{k}| = k_m$  em duas dimensões, graficada no plano  $k_x k_y$ .

## 1.4 Campo médio autoconsistente

Como um primeiro passo para incluir flutuações ao estudo de campo médio, pode-se usar a aproximação de campo auto-consistente, conhecida também por aproximação de Hartree, que consiste em tomar uma forma gaussiana do hamiltoniano (1.7) substituindo um fator  $\phi^2$  do termo  $\phi^4$  pela sua média  $\langle \phi^2 \rangle$  e determinando-a autoconsistentemente. Essa

aproximação foi usada por Brazovskii (1975) [6] para Hamiltonianos escalares e vetoriais em  $d$  dimensões com um espectro de flutuações idêntico ao obtido expandindo em série de potências de  $k$  a interação dipolar (1.19,1.41). O resultado obtido foi uma transição de primeira ordem entre uma fase desordenada e uma fase modulada, ao contrário do previsto em campo médio - e por isso também recebeu a denominação de transição de primeira ordem induzida por flutuações. Por esse ter sido um trabalho pioneiro ao analisar o impactante papel das flutuações térmicas em funcionais de Landau-Ginzburg-Wilson com o espectro de flutuações apresentando um mínimo em um vetor de onda diferente de zero, e dado o grande espectro de aplicabilidade desses modelos a problemas que apresentam fases moduladas, muitas vezes esses modelos são referenciados como pertencentes à classe de universalidade de Brazovskii.

A aproximação de Hartree consiste basicamente em contrair o termo  $\phi^4$  no Hamiltoniano (1.12) ao produto  $\langle \phi^2 \rangle \phi^2$ , tornando-o gaussiano e portanto a função de partição pode ser integrada. Então a função de correlação de dois pontos (onde o termo diagonal  $\langle \phi^2(\mathbf{x}) \rangle$  foi substituído no termo quártico) é determinada autoconsistentemente [36]. Comparando-a com as expansões perturbativas diagramáticas usualmente empregadas em sistemas quânticos de muitos corpos, ela é análoga ao método RPA (*random phase approximation*). O resultado da aproximação de Hartree foi analisado mais recentemente para o modelo de Brazovskii por Hohenberg e Swift (1995) [44]. Eles mostraram que a diferença da energia livre entre a solução desordenada  $\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle = 0$  e a solução modulada  $\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle = m_0 \cos(\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{x})$  próxima à transição de primeira ordem pode ser expandida em séries de potências da amplitude:

$$\delta F = r_R m_0^2 + \frac{1}{4} u_R m_0^4 + \frac{1}{36} w_R m_0^6, \quad (1.44)$$

onde os parâmetros  $r_R, u_R$  e  $w_R$  são renormalizados pelas flutuações do parâmetro de ordem, e  $r_R$  é determinado autoconsistentemente na aproximação de Hartree. Essa forma da energia livre de Landau, diferentemente da obtida em campo médio (1.39), se traduz em uma transição de primeira ordem. Outro resultado marcante dessa aproximação é que a fase desordenada é metaestável para toda temperatura finita abaixo da transição.

Uma questão pertinente acerca do método autoconsistente é seu limite de aplicabilidade. Como discutido por Brazovskii, ele deve ser válido para magnitudes do termo quártico interagente  $u^{1/6} \ll 1$ . Já Hohenberg e Swift obtêm, como uma condição para a aproximação se manter autoconsistente, que  $u^{1/15} \ll 1$ , isto é, que a constante de acoplamento  $u$  deve ser muitíssimo pequena. A aplicabilidade dessa aproximação em duas dimensões é contestável [45], pois sugere que a transição se dá entre uma fase desordenada diretamente a uma fase modulada com ordem orientacional de longo alcance a temperaturas finitas. Nesse caso a quebra da simetria orientacional contínua é proibida em duas dimensões nos mesmos moldes do teorema de Mermin-Wagner [7, 46], em que as flutuações térmicas podem destruir a ordem de longo alcance a qualquer temperatura

finita. De fato, como apontado por Brazovskii, o modelo em três dimensões está na sua dimensão crítica inferior, com as flutuações da solução modulada  $\langle \cos(k_0 x) \rangle$  divergindo logaritmicamente com o tamanho do sistema. Já Swift e Hohenberg (1977) [47] mostraram que a situação no caso de duas dimensões é mais delicada, onde as flutuações dessa solução divergem linearmente com o tamanho do sistema. Esse cenário sugere uma natureza diferente para a solução de baixas temperaturas, que será discutida no contexto do grupo de renormalização na próxima seção e no âmbito de aproximações elásticas para o Hamiltoniano na seção 1.6.

É importante ressaltar que outras aproximações perturbativas foram empregadas na análise do modelo de Brazovskii usando métodos do grupo de renormalização (GR) no espaço de momentos. A forma particular do espectro de flutuações ilustrado na Fig. (1.10) torna problemática a aplicabilidade dos métodos do GR a essa classe de problemas. Entretanto, novas técnicas desenvolvidas para estudar sistemas fermiônicos de muitos corpos [48] (onde as excitações de mais baixa energia também ocorrem numa superfície do espaço de momentos - a superfície de Fermi) foram empregadas no contexto da classe de Brazovskii [44,49]. Não vamos entrar nos méritos dessa discussão aqui, mas vamos apenas apontar que os resultados obtidos são satisfatoriamente próximos ao método de Hartree autoconsistente, principalmente no que diz respeito à relevância do termo  $\phi^6$  no funcional efetivo renormalizado, em acordo com energia livre de campo médio (1.44). Nesse mesmo contexto, em um resultado recente empregando as mesmas idéias do GR, Barci e Stariolo (2007) [10] mostraram que o processo de renormalização em duas dimensões leva a um Hamiltoniano efetivo com a inclusão de um acoplamento quártico com simetria quadrupolar, que modifica o tipo de transição e a natureza da fase de baixas temperaturas. Essa questão será aprofundada na próxima seção.

## 1.5 Hamiltoniano efetivo e a fase nemática

Numa visão bastante simples, a teoria do grupo de renormalização consiste na transformação envolvendo a diluição ou decimação de graus de liberdade (um *coarse grain*), acoplada com uma mudança nas escalas de comprimento. Essa transformação feita recursivamente leva à relações de recorrência para os parâmetros que caracterizam os diferentes potenciais do Hamiltoniano (por exemplo  $r$  e  $u$  no modelo  $\phi^4$ ), que convergem para valores  $(r_R, u_R)$  caracterizando a classe de universalidade da transição de fase estudada. Sendo assim, o final desse processo de renormalização leva a um funcional efetivo para a energia do problema - uma versão *coarse grained* do funcional original. No caso, se um parâmetro caracterizando um potencial converge para um valor finito, esse potencial é dito *relevante*. Por outro lado, se converge a zero é denominado *irrelevante*, já que ele não altera a classe de universalidade do problema [36].

Por exemplo, no modelo  $\phi^4$  abaixo da dimensão crítica superior, podemos supor que parâmetro do potencial quártico é não local na forma  $u(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \simeq u_0 + u_2 k^2$ , onde  $k^2$  representa qualquer combinação quadrática dos vetores  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$ . Essa forma é permitida pelas simetrias da interação ferromagnética. O resultado da aplicação do GR para esse caso é que  $u_0$  corresponde a um potencial relevante, enquanto  $u_2$  converge a zero e portanto é irrelevante. Isto é, a expansão no termo gaussiano  $r(\mathbf{k}) = r_0 + ck^2$  é suficiente para descrever corretamente a transição do ferromagneto uniaxial.

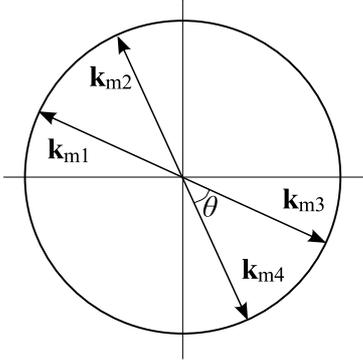


Figura 1.11: Representação dos quatro vetores de onda da energia de interação na superfície de mínima energia.

força a simetria  $u(\theta) = u(\theta + \pi)$ . Dessa forma, a interação quártica é representada não por algumas constantes, mas por uma função contínua de um ângulo. Essa função pode ser expandida numa série de Fourier:

$$u(\theta) = u_0 + u_2 \cos(2\theta) + u_4 \cos(4\theta) + \dots, \quad (1.45)$$

onde o primeiro termo corresponde ao considerado usualmente na teoria de Brazovskii, e todos os outros termos são relevantes no sentido do GR [10]. Com o intuito de analisar como o potencial caracterizado por  $u_2$  altera o tipo de transição no sistema, por simplicidade os autores analisaram o efeito dos dois primeiros termos. O tipo de simetria  $u(\theta) = u(\theta + \pi)$  sugere a correspondência com o parâmetro de ordem nemático de cristais líquidos em duas dimensões:

$$\hat{Q}_{ij}(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) \left( \nabla_i \nabla_j - \frac{1}{2} \nabla^2 \delta_{ij} \right) \phi(\mathbf{x}), \quad (1.46)$$

onde  $i, j$  assumem valores 1 e 2 correspondendo às coordenadas cartesianas. Esse parâmetro de ordem tensorial é simétrico e possui traço nulo, e é interpretado como o momento quadrupolar para a densidade  $\phi^2$ . Como será mostrado no próximo capítulo, esse parâmetro de ordem possui a simetria nemática, isto é, a orientação das faixas ou das modulações

do campo  $\phi$  é independente do sentido de seu vetor gradiente  $\nabla\phi(\mathbf{x})$ , assim como a direção das moléculas anisotrópicas que compõem os cristais líquidos. Com a representação do termo quadrupolar em termos do parâmetro de ordem nemático, o termo de interação pode ser escrito como:

$$H_{int} = \int d^2x \{u_0\phi^4(\mathbf{x}) + u_2 \text{tr} \hat{Q}^2\}. \quad (1.47)$$

Como  $\langle\phi(\mathbf{x})\rangle$  corresponde à ordem posicional e  $\int d^2x \langle\hat{Q}_{ij}(\mathbf{x})\rangle$  à ordem orientacional, pode haver casos em que uma fase com ordem orientacional apenas e com simetria nemática  $\theta \rightarrow \theta + \pi$  seja estável. Através da aproximação de Hartree para esse Hamiltoniano efetivo, Barci e Stariolo [10] mostraram que o sistema sofre uma transição contínua para uma fase com ordem orientacional apenas, a *fase nemática*, caso a interação quadrupolar seja atrativa, isto é  $u_2 < 0$ . Nesse nível de aproximação, que corresponde a uma aproximação de campo médio autoconsistente para  $\phi$  e de campo médio para  $Q_{ij}$ , a transição à fase nemática é de segunda ordem - como veremos logo adiante, flutuações térmicas modificam esse cenário. Um dos resultados obtidos por Barci e Stariolo que será usado para discussão desse trabalho é a forma calculada para o fator de estrutura da fase nemática:

$$S(\mathbf{k}) = \frac{T}{r + a_2(k - k_0)^2 - \alpha k^2 \cos(2\theta)u_2}, \quad (1.48)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre  $\mathbf{k}$  e a direção média do sistema na fase nemática. Aqui  $a_2$  é o parâmetro medindo a curvatura do espectro de flutuações em torno do mínimo  $k_m$ ,  $u_2$  é o parâmetro de interação quadrupolar, e  $r$  e  $\alpha$  são a massa renormalizada e a amplitude do parâmetro de ordem nemático obtidos autoconsistentemente pelas equações:

$$r = r_0 + u_0 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} S(\mathbf{k}), \quad (1.49)$$

$$\alpha = -\frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} k^2 \cos(2\theta) S(\mathbf{k}). \quad (1.50)$$

Partindo da energia livre obtida integrando a função de partição do modelo na aproximação de Hartree, os autores mostraram que, considerando flutuações angulares  $\varphi(\mathbf{x})$  na direção média do sistema, a transição entre a fase isotrópica e a fase nemática é descrita por uma energia livre para as flutuações na forma:

$$\delta F = K(T) \int d^2x |\nabla\varphi(\mathbf{x})|^2, \quad (1.51)$$

onde a função da temperatura  $K(T)$  depende dos parâmetros microscópicos do modelo de Brazovskii com a interação quadrupolar. Essa energia livre tem a mesma forma da energia livre para o modelo XY em duas dimensões, onde ocorre a transição de Kosterlitz-Thouless (KT). Essa é uma transição mediada por defeitos topológicos, onde no caso do modelo XY vórtices abaixo da temperatura de transição se tornam ligados formando uma

fase com ordem dita de quase longo alcance, isto é, as correlações espaciais decaem com uma lei de potência com um expoente dependente da temperatura.

No caso do Hamiltoniano de Brazovskii, Barci e Stariolo mostraram que o problema da transição para baixas temperaturas pode ser mapeado, em ordem dominante nas flutuações direcionais, no modelo XY, onde as disclinações, defeitos topológicos característicos dos sistemas de faixas, desempenham o papel dos vórtices na transição. Essa transição e a natureza das fases de baixa temperatura foram previstas por Toner e Nelson (1981) [11] no contexto das transições mediadas por defeitos para filmes de cristais líquidos esmécticos e colestéricos, que também possuem um parâmetro de ordem modulado em duas dimensões, analogamente às faixas. Essa abordagem assim como alguns de seus aspectos são o tema da próxima seção. Na verdade, essas duas abordagens são complementares e levam ao mesmo diagrama de fases, com a diferença de que a teoria revisada nessa seção parte diretamente do modelo mais microscópico e mostra como as flutuações levam a interações quárticas efetivas que representam interações multipolares, onde a interação quadrupolo-quadrupolo é a primeira contribuição não trivial. Ela também possibilita a alternativa de interpretar a fase nemática como uma condensação quadrupolar, em vez de uma fase constituída por pares ligados de defeitos topológicos. No próximo capítulo apresentaremos os resultados das simulações de Langevin para o modelo dipolar contínuo onde encontramos evidências da fase nemática a baixas temperaturas, com um fator de estrutura bem descrito pela forma apresentada na equação (1.48).

## 1.6 Hamiltonianos elásticos

Nas seções anteriores exploramos a transição em campo médio para uma fase modulada com ordens orientacional e posicional de longo alcance e na seção 1.4 consideramos os "modos de flutuação de densidade" no parâmetro de ordem implicando uma transição de primeira ordem para fase modulada, mas que em duas dimensões tem sua validade questionável. Isto porque a quebra de uma simetria contínua, a orientacional, não pode se dar em duas dimensões [7]. Isso ficou evidente na seção anterior, onde delineamos que interações multipolares efetivas com simetria nemática que surgem devido ao efeito das flutuações térmicas são todas relevantes. Como ficou claro, a orientação das faixas, dadas pelo vetor gradiente do campo  $\phi$ , é de natureza análoga à do modelo XY em duas dimensões e portanto esperamos a mesma fenomenologia para o caso do derretimento das faixas. Nessa seção apresentaremos uma abordagem que evidencia o papel das diferentes excitações e defeitos topológicos suportados pelo sistema de faixas, os chamados "modos de flutuação elásticos", e que será utilizada no próximo capítulo para comparação com os resultados obtidos neste trabalho.

Como apontado na seção 1.1 desse capítulo, o estado fundamental de faixas é uma

realização particular de sólidos bidimensionais com periodicidade unidimensional. O problema da fusão bidimensional em sólidos e da ausência de ordem de longo alcance a baixas temperaturas é de longa data e o tipo de ordem e transições comportados ainda é matéria de controvérsia nesse campo [51]. Nesta seção iremos revisar aspectos da teoria de Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson e Young (KTHNY) [34] para transições mediadas por defeitos nesses sólidos, que foram estendidas para o caso de cristais líquidos esméticos bidimensionais e sistemas que formam faixas por Toner e Nelson (1981) [11]. No contexto da formação de domínios de faixas em filmes finos magnéticos, Garel e Doniach (1982) [39] empregaram essas técnicas partindo de uma aproximação harmônica para a energia livre na aproximação de campo médio do seu modelo de Landau-Ginzburg. A seguir seguiremos seus passos, em que o caso é análogo ao modelo dipolar contínuo estudado nesta tese. Partimos da aproximação de campo médio mantendo apenas o termo gaussiano tal que a energia livre é escrita por:

$$F = \frac{1}{2L^2} \sum_{\mathbf{k}} A(k) \phi(\mathbf{k}) \phi(-\mathbf{k}). \quad (1.52)$$

Como agora estamos interessados em descrever modos elásticos, tomamos a diferença energética associada a desvios do vetor de onda característico  $k_m$ :

$$\delta F = \frac{1}{2L^2} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \phi(-\mathbf{k}) a_2 (k - k_m)^2, \quad (1.53)$$

onde tomamos a aproximação para o espectro de flutuações dada por (1.41). Tomando apenas pequenos desvios em torno de  $k_m$ , a expressão acima pode ser aproximada por:

$$\delta F \approx \frac{1}{2L^2} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \phi(-\mathbf{k}) a_2 (k - k_m)^2 \frac{(k + k_m)^2}{(2k_m)^2}, \quad (1.54)$$

$$= \frac{1}{2L^2} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) \phi(-\mathbf{k}) a_2 \frac{(k^2 - k_m^2)^2}{(2k_m)^2}, \quad (1.55)$$

$$= \frac{a_2}{8k_m^2} \int d^2x \left[ (\nabla^2 \phi(\mathbf{x}))^2 - 2k_m^2 (\nabla \phi(\mathbf{x}))^2 + k_m^4 \phi^2(\mathbf{x}) \right]. \quad (1.56)$$

Partindo dessa diferença de energia livre, assumiremos que a solução de modo único é perturbada por um campo de deformação elástica  $u(x, y)$  (ver Fig. 1.12), sendo que a solução é modulada na direção  $\hat{x}$ :  $\phi(\mathbf{x}) = \phi_0 \cos(k_m x + u(x, y))$ . Inserindo essa solução perturbada na energia elástica (1.56), e mantendo apenas os termos de ordem quadrática em  $u$  obtemos:

$$\delta F \approx \frac{a_2 \phi_0^2}{16k_m^2} \int d^2x \left[ 4k_m^4 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + k_m^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)^2 \right], \quad (1.57)$$

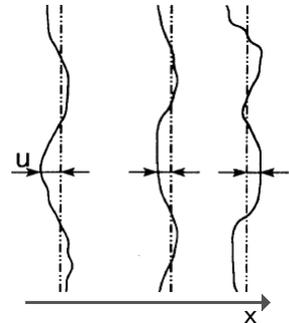


Figura 1.12: Ilustração do campo de deslocamento  $u(x, y)$  nas paredes de domínio da solução de modo único com modulação na direção  $\hat{x}$ .

onde mais uma aproximação foi feita desprezando a contribuição  $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)^2$  no segundo termo em frente ao primeiro termo  $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2$ . No caso da energia livre descrita por (1.57), Toner e Nelson [11] mostraram que o primeiro termo corresponde aos modos de flutuação da largura das faixas, enquanto o segundo corresponde a flutuações nas curvaturas delas. Essa interpretação pode se feita com auxílio da figura 1.13.A. Essas duas flutuações são denominadas por flutuações tipo fônon nessa aproximação, e denominadas em geral por *flutuações de ondulação* correspondendo a qualquer combinação de modos de deslocamentos das faixas. A forma funcional da energia livre descrita pela equação (1.57) é a mesma que descreve a elasticidade no caso dos cristais líquidos na *fase esmética* em duas dimensões, considerados por Toner e Nelson. Eles mostraram que, ao considerar flutuações térmicas, as funções de correlação do campo  $\langle\phi(\mathbf{x})\phi(0)\rangle$  para qualquer temperatura finita decaem exponencialmente a zero nas duas direções, sendo que na direção perpendicular às faixas elas decaem mais lentamente - como uma exponencial esticada de expoente  $\frac{1}{2}$ . Isso significa, além de que flutuações nas curvaturas das faixas sejam energeticamente menos custosas, que a ordem translacional é de curto alcance a qualquer temperatura finita. Logo, a fase de faixas com ordem translacional de longo alcance é instável para qualquer temperatura finita devido às flutuações de ondulação nas paredes de domínio. Esse cenário pode mudar no caso do efeito de anisotropias devido um campo cristalino, por exemplo. Esse caso será considerado ao final desta seção.

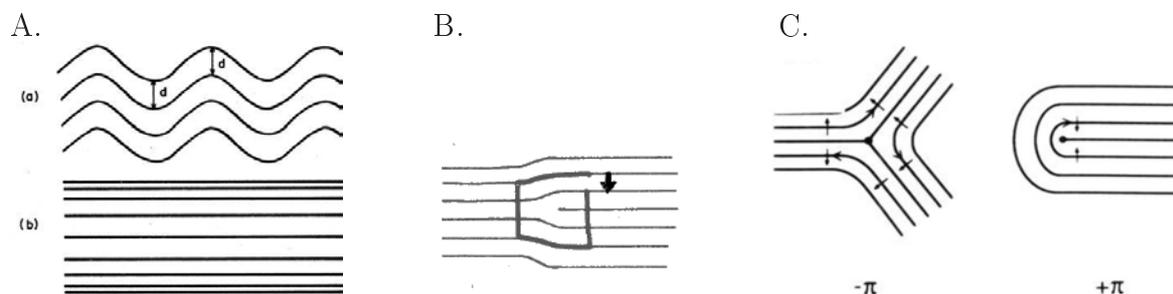


Figura 1.13: **A.** os diferentes modos fundamentais das flutuações de ondulação descritas por (1.57), que são basicamente deslocamentos, perturbações ou sinuosidades nas paredes das faixas. **B.** discordância em sistemas de faixas. A intensidade de uma discordância é medida pelo seu vetor de Burgers, definido por o quanto um circuito em torno da discordância falha em fechar. Sua geometria caracteriza um defeito translacional. **C.** disclinações em sistemas de faixas. Uma carga pode ser assinalada a esses defeitos notando que um vetor normal às faixas executa uma rotação de  $\pm\pi$  em um circuito em torno da disclinação  $+$  ou  $-$ . Uma disclinação  $+$  ( $-$ ) também é denominada côncava (convexa) e suas geometrias as caracterizam como defeitos orientacionais. Figuras adaptadas de [11].

Apesar da ordem translacional ser de curto alcance, nesse caso a ordem orientacional ainda é de longo alcance. Podemos definir o parâmetro de ordem nemático como na seção

anterior (1.46), onde na presente aproximação as flutuações de ondulação fazem com que a flutuação da direção local das faixas em relação à direção  $\hat{x}$  (direção média do sistema) possa ser descrita pela flutuação angular  $\varphi(\mathbf{x}) \approx \partial_y u(\mathbf{x})$ . Embora a ordem orientacional nesse caso não seja decorrelacionada pelas flutuações de ondulação, existem ainda outros tipos de excitação que o sistema de faixas sofre. Esses são os defeitos topológicos, em que, nos sistemas que formam faixas, os mais simples são as *discordâncias* e as *disclinações* (ver Fig. 1.13). Um defeito topológico é um campo de um parâmetro de ordem que não pode ser eliminado por nenhuma distorção contínua do parâmetro de ordem. Por exemplo, nas flutuações de ondulação representadas na Fig. 1.12, o parâmetro de ordem  $\phi$  pode ser suavizado tal que volte a corresponder ao estado fundamental de faixas. Um defeito topológico contém um núcleo, onde o parâmetro de ordem vai a zero, a ordem então é quebrada nesse local, e ao redor dele o parâmetro de ordem varia suavemente [36], atribuindo uma carga topológica ao defeito. Talvez o exemplo mais conhecido sejam os vórtices no modelo XY. No caso das faixas as discordâncias caracterizam um defeito translacional e as disclinações caracterizam um defeito orientacional. Podemos observar na figura 1.13 que se "juntarmos" os dois tipos de disclinações obteremos uma discordância, isto é, uma discordância é um par ligado de disclinações.

No caso da fase esmética, estável somente à temperatura zero para interações isotrópicas, os autores mostraram que ela suporta pares ligados de discordâncias. No entanto, devido às flutuações de ondulação e às discordâncias livres, a fase de faixas se transforma em uma fase nemática para qualquer temperatura não nula. A fase nemática possui as assinaturas típicas das fases de baixas temperaturas em transições mediadas por defeitos:

1. apresenta pares ligados de disclinações - correspondendo às discordâncias livres - que introduzem uma nova escala de comprimento, a distância característica entre as discordâncias livres ( $\xi_D$ ) que é uma função da temperatura;
2. a ordem orientacional, caracterizada pela função de correlação nemática, se mantém robusta para distâncias menores que  $\xi_D$ , sendo apenas perturbada por flutuações de ondulação. No entanto para distâncias maiores que  $\xi_D$ , a ordem orientacional decai algebricamente - tal qual sobre um ponto crítico nas transições de fases de segunda ordem - com o expoente da lei de potências dependendo da temperatura. Esse tipo de comportamento da função de correlação caracteriza uma ordem de quase longo alcance.

Essa escala de comprimento  $\xi_D$  entre as discordâncias livres/disclinações ligadas é aquela que separa as distâncias onde a ordem orientacional é robusta daquelas quando é decorrelacionada lentamente pelos defeitos orientacionais ligados. Essa escala permite conceber a fase nemática como sendo compostas por células de tamanho  $\xi_D$ , sendo que essas células são anisotrópicas devido ao fato das flutuações de ondulação (ver Fig. 1.14) paralelas às faixas serem menos suscetíveis às flutuações.

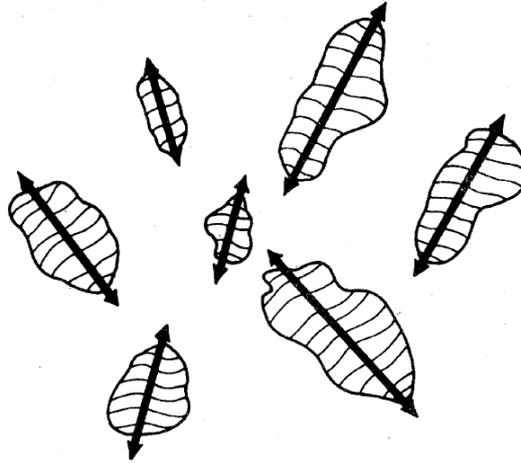


Figura 1.14: Representação visual da fase nemática, resultante da atuação das flutuações de ondulação e dos pares ligados de disclinações. A orientação de cada célula é então dada pela média das orientações das faixas englobadas por ela. Figura adaptada de [11].

A energia livre elástica na fase nemática é obtida por Toner e Nelson comparando as correlações orientacionais (que são obtidas através de aproximações para a energia livre (1.57) com as contribuições energéticas das discordâncias livres) com o resultado que seria obtido através da conhecida energia livre de Frank para cristais líquidos nemáticos bidimensionais. Para distâncias grandes eles obtêm a mesma energia descrita pela equação (1.51). Portanto, na temperatura da transição de Kosterlitz-Thouless, disclinações desligadas passam a ser menos custosas energeticamente e o sistema passa a uma fase isotrópica, com ordens orientacional e translacional de curto alcance.

### Efeito de anisotropias

O caso da teoria KTHNY na presença de um substrato, em que a isotropia do sistema é quebrada e passa a ter direções preferenciais, já foi considerado em muitos contextos. Para sistemas de faixas, Ostlund e Halperin (1981) [52] indicaram que um substrato cristalino pode estabilizar a fase esmética a temperaturas finitas, onde a anisotropia introduz um termo  $(\partial_y u)^2$  na energia elástica (1.57). O sistema então passa para a fase nemática via uma transição tipo KT mediada por pares de discordâncias. No contexto de filmes ultrafinos magnéticos com anisotropia perpendicular, Czech e Villain (1989) [27] desenvolveram uma energia livre efetiva de baixas temperaturas para perturbações discretas (dobras ou torções, do inglês *kinks*) em uma solução modulada da energia livre de Bragg-Williams do modelo ferromagnético de Ising com interações dipolares. A energia livre efetiva obtida pelos autores é análoga a modelos para interfaces cristalinas, um modelo sólido sobre sólido (SOS) anisotrópico. A baixas temperaturas a posição das paredes de domínio estão fixadas (*pinned*) à rede, passando via uma transição de rugosidade (*roughening transition*)

a um "sólido flutuante" (do inglês *floating solid*), onde os domínios não estão mais fixados a rede e não possuem ordem posicional. Segundo os autores, essa transição é a mesma transição tipo KT mediada por pares de discordâncias considerada no contexto da teoria KTHNY de sólidos bidimensionais em um substrato periódico [53].

De importante relevância para o presente trabalho, no caso específico de filmes ultrafinos magnéticos com anisotropia perpendicular, Kashuba e Pokrovsky (1993) [54] e Abanov e colaboradores (1995) [55] derivaram uma aproximação elástica para o modelo microscópico de spins de Heisenberg (1.1) apresentado na seção 1.1, com a diferença de que eles levaram em conta uma anisotropia cristalina com simetria tetragonal. Abanov e colaboradores mostraram que a fase esmética é estável para temperaturas finitas e indicaram dois possíveis cenários, dependendo das energias elásticas relativas, para a passagem a uma fase desordenada que eles denominaram de "líquido tetragonal". No primeiro cenário a fase esmética passa ao líquido tetragonal diretamente via uma transição de primeira ordem. No outro cenário, o mais provável segundo os autores, é que a fase esmética sofre uma transição tipo KT como mencionado há pouco, para uma fase nemática que ele denominaram "Ising nemática", já que nessa fase intermediária a anisotropia tetragonal estabiliza a ordem orientacional como de *longo alcance*. A passagem para o líquido tetragonal é dominada pela energia de anisotropia de orientação das faixas, onde a prevalência de defeitos orientacionais, chamados de paredes de domínio de faixas (ver Fig. 1.15), sobre os pares ligados de disclinação levam a uma transição de segunda ordem da classe de universalidade de Onsager-Ising.

Embora as análises feitas por Abanov e colaboradores sejam a proposta mais próxima das observações experimentais até o momento, os experimentos mais recentes [18, 43] que foram detalhados na seção 1.1 apontam para um cenário de "sólido flutuante" onde o efeito das anisotropias induzidas pela rede é muito reduzido. Segundo Portmann e colaboradores [12], que observaram alguns efeitos do substrato de Cu(100) sobre a estrutura de domínios magnéticos de faixas apresentadas pelo filme de Fe, o efeito das anisotropias cristalinas é quase inexistente devido à diferença das escalas de comprimento, onde a constante de rede é aproximadamente  $a \approx 0.1nm$  enquanto as larguras das faixas são da ordem de  $1\mu m$ . No entanto, o substrato fornece um centro de *pinning* tal que a posição das faixas não flutua livremente como um sólido flutuante verdadeiro - tanto que a fase esmética é observada nesses experimentos (ver Fig. 1.7.a). Os autores também analisaram o caso em que o substrato de Cu(100) forma uma cunha de aproximadamente  $3^\circ$  que cria uma rede de degraus monoatômicos de periodicidade  $\sim 3.5nm$ . Nesse caso uma anisotropia é cri-

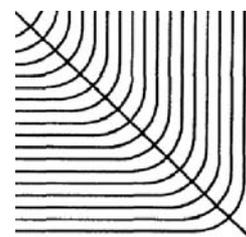


Figura 1.15: Paredes de domínio de faixas, estabilizadas devido o efeito da anisotropia cristalina. Figura adaptada de [55].

ada e as faixas se alinham preferencialmente paralela ou perpendicularmente aos degraus. Embora a simetria tetragonal na orientação das faixas observada fossem evidentes, como disclinações de simetria quadrada na fase isotrópica, os autores não observam nenhuma mudança na natureza do processo de perda de ordem orientacional, reforçando o fraco papel das anisotropias cristalinas (*floating solid*) em contraposição às previsões de Abanov e colaboradores.

Relevantes ainda para o contexto do papel das anisotropias cristalinas nas propriedades elásticas dos modelos para as transições de fase mediadas por defeitos estão as análises teóricas, numéricas e experimentais de modelos e sistemas que pertencem à classe de universalidade do modelo XY. Como foi discutido anteriormente, a transição nemática-isotrópica é mapeada nesse modelo. Nesse caso a ordem nemática possui a simetria adicional de inversão  $\theta \rightarrow \theta + \pi$  em relação ao modelo de spins planares, e as disclinações então correspondem aos vórtices com uma carga topológica modificada. Estudos do GR aplicados ao modelo XY com uma anisotropia tetragonal, denominados modelos  $XYh_4$ , foram realizados por José e colaboradores (1977) [56], que apontaram um comportamento não-universal para a criticalidade do problema. No caso do modelo XY isotrópico, e em geral nas transições mediadas por defeitos, as quantidades termodinâmicas possuem uma divergência exponencial na temperatura de transição caracterizadas por números universais - expoentes críticos "não convencionais" já que não são associados a divergências dadas por leis de potência. Com um campo anisotrópico  $h_4$  atuando sobre os spins planares, os autores mostraram que a transição se torna de segunda ordem com os expoentes críticos *não universais* variando continuamente com  $h_4$ , por exemplo o expoente crítico da divergência da magnetização variando com  $\beta \propto 1/h_4$ . Recentemente Taroni e colaboradores (2008) [57] através de uma compilação de resultados experimentais na literatura e simulações de Monte Carlo para o modelo XY com anisotropia tetragonal sugerem que essa variação não universal dos expoentes críticos é limitada em uma "janela" universal entre as classes de universalidade do modelo XY isotrópico e do modelo de Ising.

A procura por evidências destes cenários é uma das motivações deste trabalho e serão discutidos e comparados com os nossos resultados apresentados no próximo capítulo.

# Capítulo 2

## Simulações de Langevin

Neste capítulo apresentamos os resultados principais desta tese, em que, através de simulações da dinâmica de Langevin para o modelo dipolar contínuo, obtivemos resultados consistentes apontando a estabilidade de uma fase termodinâmica de natureza nemática a baixas temperaturas. Começamos com a escolha apropriada da dinâmica que caracteriza o contato do sistema com um banho térmico, seguido pela sua implementação numérica, que levará ao algoritmo usado para as simulações computacionais. Depois apresentaremos alguns resultados, como as propriedades do estado fundamental e a dependência da largura da faixa com a temperatura, comparando-os com as previsões teóricas e resultados experimentais do capítulo anterior. Por fim, apresentaremos os resultados de equilíbrio obtidos nas simulações que confirmam a estabilidade da fase nemática.

### 2.1 Dinâmica de Langevin

Nesta seção introduzimos a dinâmica natural para o modelo dipolar contínuo (1.12) em contato com um banho térmico. Essa dinâmica é descrita por uma equação estocástica em que a relaxação do campo  $\phi$  a um mínimo de energia é frustrada pelo efeito de um ruído térmico. É uma generalização da equação de Langevin para descrever o movimento Browniano ao caso de um sistema de muitos corpos, que será discutida a seguir.

#### Equação de Langevin

Em 1908, Paul Langevin propôs uma equação de Newton *fenomenológica* para descrever o movimento Browniano de uma partícula coloidal suspensa em um líquido. Sua interpretação era de que o movimento dessa partícula era descrito pela ação de dois tipos de forças provenientes do impacto com as moléculas do líquido: colisões aleatórias com a partícula Browniana atuavam como uma força dirigindo seu movimento rápido e errático

(força estocástica), o que levaria a uma força friccional (força sistemática) atuando sobre a partícula em uma escala maior de tempo. Como será apontado logo adiante, uma relação interna entre essas forças resulta do fato de ambas terem a mesma origem microscópica.

A equação de Newton proposta foi:

$$m \frac{dv}{dt} = -\frac{v}{B} + F(t), \quad (2.1)$$

onde o primeiro termo do lado direito é a força devido à viscosidade do meio, com  $B$  sendo a mobilidade, e  $F(t)$  é a força aleatória, sobre a qual Langevin fez duas suposições fundamentais:

1. A força média devida às colisões é nula:

$$\langle F(t) \rangle = 0. \quad (2.2)$$

2. As colisões sucessivas são independentes, ou descorrelacionadas:

$$\langle F(t)F(t') \rangle = C\delta(t - t'), \quad (2.3)$$

onde  $C$  mede a intensidade da força estocástica e  $\langle \dots \rangle$  é a média sobre um conjunto de diferentes realizações. A primeira condição reflete a ausência de uma direção preferencial, enquanto a segunda implica que a partícula não guarda memória das sucessivas colisões, o que significa que o tempo característico de interação entre a partícula Browniana e as moléculas do líquido é muito menor que os tempos de observação.

Utilizando as propriedades estatísticas do ruído para obter a solução da equação (2.1) para a velocidade média e a velocidade quadrática média a tempos longos (após a relaxação inicial devido ao termo de atrito frente o termo inercial), juntamente com a suposição de que a partícula Browniana está em equilíbrio térmico com o líquido e que, portanto, vale o princípio da equipartição da energia, Langevin obteve a relação:

$$C = \frac{2k_B T}{B}, \quad (2.4)$$

conhecida como *relação de Einstein*, que a derivou de uma maneira diferente em 1905, ou *relação de flutuação-dissipação*, exprimindo a conexão entre as flutuações da força estocástica e a dissipação contida na força de atrito, como uma consequência da condição de equilíbrio térmico com o meio à temperatura  $T$ . Pode-se estender o caso de uma partícula Browniana para sistemas de muitas partículas em contato com um reservatório térmico e sujeitas a tipos variados de forças determinísticas [58]. Para um primeiro passo na aplicação da equação de Langevin a outros casos, reescreve-se (2.1) em termos do momento e do Hamiltoniano da partícula Browniana:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{p}{mB} + F(t) = -\frac{1}{B} \frac{\partial H}{\partial p} + F(t). \quad (2.5)$$

Para determinar as propriedades dinâmicas de teorias de campos de Landau-Ginzburg-Wilson, a teoria de Langevin é naturalmente generalizada para campos contínuos. Sua forma específica depende da natureza em grandes comprimentos de onda e baixa frequência temporal do sistema microscópico que se tem intenção de modelar (por exemplo se há ou não algum vínculo restringindo a dinâmica do parâmetro de ordem).

### Equação de Ginzburg-Landau dependente do tempo

No caso dos filmes ultrafinos magnéticos com anisotropia perpendicular, a condutividade térmica dos fônons da rede cristalina é muito maior que se comparada a dos momentos magnéticos, assim que a energia dos momentos magnéticos é transferida rapidamente para o substrato e a magnetização não obedece nenhum vínculo conservativo. Neste caso a dinâmica de Langevin para o sistema é puramente dissipativa e sua generalização para os campos  $\phi(\mathbf{x})$  com um Hamiltoniano fenomenológico  $H$  é imediata a partir de (2.5):

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (2.6)$$

com

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad (2.7)$$

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2\Gamma T \delta(t - t') \delta^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.8)$$

onde novamente escolhemos  $k_B = 1$  e  $\Gamma$  é um coeficiente dissipativo fenomenológico. A relação de flutuação-dissipação é a condição para que o estado assintótico esteja em equilíbrio com o banho térmico, e  $\eta(t)$  é um campo estocástico independente para cada posição no espaço usualmente chamado de *ruído branco*, que é descorrelacionado no tempo e tem uma distribuição de probabilidades gaussiana. Esse campo incorpora à dinâmica os graus de liberdade com vetores de onda maiores que a frequência de corte introduzida no "coarse graining" para o Hamiltoniano efetivo, assim como outros graus de liberdade rápidos que não são descritos por  $\phi$ . Na ausência do ruído branco  $\eta$ , as variáveis  $\phi$  na equação (2.6) relaxam aos valores de configurações que minimizam a energia. Esse modelo fenomenológico para a dinâmica recebeu diferentes nomes ao longo da história, devido as diferentes contextos ou problemas em que foi introduzido. Ele é frequentemente referido como modelo de Ginzburg-Landau dependente do tempo, ou modelo A, segundo a classificação de Hohenberg e Halperin (1977) para a teoria de fenômenos críticos dinâmicos [59]. Cabe ressaltar que, no presente caso onde o espectro de flutuações possui um mínimo em um vetor de onda diferente de zero, essa equação tem correspondentes em modelos para formação de padrões espaciais fora de equilíbrio, como a equação de Swift-Hohenberg [47] para descrever a convexão de Rayleigh-Bénard, e que recebem a classificação de modelo  $I_s$  por Cross e Hohenberg (1993) [60] nesse contexto de formação de padrões espaciais estacionários fora de equilíbrio.

A equação de Langevin acima também pode ser derivada a partir da equação também fenomenológica para a dinâmica micromagnética, a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, em sua versão estocástica, que leva em conta os efeitos da interação da magnetização com os graus de liberdade microscópicos (fônons, elétrons de condução, spins nucleares, etc.), o que se traduz na agitação térmica que causa mudanças contínuas na orientação do momento [61, 62]. No caso de filmes magnéticos ultrafinos se pode mostrar que a forte anisotropia uniaxial possibilita desacoplar a evolução da componente perpendicular das componentes planares [63], recaindo na equação de Langevin (2.6). Finalmente, essa equação para o modelo dipolar contínuo é explicitamente escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) + r \phi(\mathbf{x}, t) - u \phi^3(\mathbf{x}, t) \\ &\quad - \frac{1}{\delta} \int_a d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}', t) J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) + \eta(\mathbf{x}, t) / \Gamma, \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde colocamos explicitamente o espaçamento entre sítios  $a$ , equivalente a uma frequência de corte ultravioleta, na integral da interação dipolar. Aqui usamos  $r = |r_0|$ , onde o parâmetro  $r_0$  é tomado como negativo, já que estamos interessados em analisar a formação de faixas do sistema a baixas temperaturas, tal que o potencial local tenha a forma desejada de duplo poço. É conveniente expressar as equações de Langevin (2.9) na forma adimensional por meio da seguinte transformação de variáveis [64]:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\rightarrow (r)^{\frac{1}{2}} \mathbf{x} \\ \phi &\rightarrow \left(\frac{u}{r}\right)^{\frac{1}{2}} \phi \\ t &\rightarrow (\Gamma r) t. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Restam agora apenas três parâmetros relevantes para a dinâmica, que são renormalizados da seguinte maneira:

$$\delta = r^{\frac{1}{2}} \delta \quad (2.11)$$

$$T = \frac{u}{r} T \quad (2.12)$$

$$a = r^{\frac{1}{2}} a. \quad (2.13)$$

Essas transformações levam a equação (2.9) para seguinte forma adimensional:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) + \phi(\mathbf{x}, t) - \phi^3(\mathbf{x}, t) \\ &\quad - \frac{1}{\delta} \int_a d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}', t) J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) + \eta(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (2.14)$$

com uma frequência de corte em distâncias curtas  $a = 2\pi/\Lambda$  e uma correlação do termo de ruído  $\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2T \delta(t - t') \delta^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ . É interessante escrever essa equação de Langevin no espaço de Fourier:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -A(k) \phi(\mathbf{k}, t) + [-\phi^3(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t)]_{\mathbf{k}}^F. \quad (2.15)$$

Para fins de clareza e compatibilidade com a subsequente implementação numérica dessa equação, os últimos dois termos não foram escritos explicitamente no espaço de Fourier. Aqui  $\int_{\mathbf{k}}^F$  significa a  $\mathbf{k}$  componente da transformada de Fourier. Agora o espectro de flutuações é escrito como:

$$A(k) = k^2 - 1 + J(k)/\delta. \quad (2.16)$$

Em geral se pode afirmar que uma solução modulada de vetor de onda característico  $k_0$  será estável na dinâmica de Langevin, isto é, terá uma amplitude finita, se  $A(k_0) < 0$ . Após apresentarmos a metodologia empregada para as simulações, ilustrar algumas propriedades dos estados fundamentais e o papel do espectro de flutuações na estabilidade dos modos será melhor avaliado.

## 2.2 Implementação numérica

Nesta seção vamos apresentar os métodos empregados para implementação numérica da equação diferencial estocástica (2.15). Começaremos pela discretização espacial do problema, seguindo pela escolha apropriada das condições de contorno e os métodos de aproximação para lidar com as interações espaciais do modelo. Depois de representar todos os termos da equação de Langevin no espaço discreto, inclusive o termo de ruído, apresentaremos o método de integração temporal empregado.

Como primeiro passo, definimos a discretização espacial em uma rede quadrada de espaçamento  $a$ :

$$\mathbf{x} = a(i\hat{x} + j\hat{y}) \quad \text{com } i, j = 1, 2 \dots L \quad (2.17)$$

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{aL}(l\hat{x} + m\hat{y}) \quad \text{com } l, m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \pm L/2, \quad (2.18)$$

onde  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  são os vetores unitários dos eixos cartesianos da rede. A passagem do contínuo ao discreto no Hamiltoniano (1.12) pode ser sintetizada pela seguinte substituição:

$$\int d^2x \rightarrow a^2 \sum_{\mathbf{x}}, \quad (2.19)$$

o que leva a um fator multiplicativo  $a^2$  em frente a interação dipolar e  $a^2$  multiplicando todo o Hamiltoniano na sua versão discreta. O espectro de flutuações no caso de espaço discreto é então escrito como:

$$A(k) = k^2 - 1 + \frac{a^2}{\delta} J(k). \quad (2.20)$$

Um problema que surge ao implementar numericamente a equação de Langevin é lidar com a interação dipolar numa rede quadrada finita. Dependendo do tamanho e da

configuração do campo  $\phi$ , seus efeitos de longo alcance podem levar a resultados espúrios, como a efeitos da forma da amostra ou efeitos de borda que alteram a natureza das configurações que minimizam a energia do sistema. Seu efeito pode ser particularmente drástico em efeitos de tamanho finito nas transições de fases que o sistema apresenta. Para minimizar todos esses efeitos, a interação dipolar é calculada no início da implementação numérica usando a técnica das somas de Ewald, que assume infinitas réplicas periódicas do sistema e utiliza um caso particular da fórmula da soma de Poisson, substituindo as somas espaciais da interação sobre todas réplicas por somas no espaço de Fourier, onde as somas são rapidamente convergentes [65]. O resultado é que a interação dipolar  $J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3$  sofre correções para distâncias grandes, ou vetores de onda pequenos. Como as distâncias entre os sítios da rede se mantém constante ao longo da simulação, a matriz  $J(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  modificada pelas somas de Ewald sob as infinitas réplicas precisa ser calculada somente no início da simulação.

Como a interação ferromagnética é de curto alcance, basta truncar a interação com os vizinhos nas primeiras réplicas, o que equivale a ter condições de contorno periódicas no próprio sistema, esse sendo equivalentemente visualizado como um toro bidimensional. Para implementação dessa interação, ao invés de tomarmos uma aproximação de diferença finita em primeiros ou segundos vizinhos para o laplaciano na rede, o que implicaria em reforçar direções preferenciais para a interação, usamos a forma isotrópica do laplaciano no espaço de Fourier:  $k^2$ . Isso equivale no espaço das coordenadas a tomar uma contribuição ponderada de todos os vizinhos do sítio. A vantagem de calcular a energia local de um sítio no espaço de Fourier também se reflete no custo computacional para o cômputo da interação dipolar. Ao invés de calcularmos a soma dupla, um processo da ordem de  $L^4$  operações, usamos o teorema da convolução:

$$\sum_{\mathbf{x}'} \phi(\mathbf{x}') J(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) J(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = [\phi(\mathbf{k}) J(\mathbf{k})]_{\mathbf{x}}^{F^{-1}}, \quad (2.21)$$

onde  $]_{\mathbf{x}}^{F^{-1}}$  é a componente  $\mathbf{x}$  da anti-transformada de Fourier. Assim podemos aproveitar a eficiência das rotinas de FFT (transformadas rápidas de Fourier) em diminuir consideravelmente o tempo de transformação. Nesse caso, a escolha certa para uma rotina de FFT pode trazer muitas vantagens. Rotinas usuais geralmente se restringem a algoritmos para tamanhos lineares  $L$  que são potências de 2, ou de outros números primos, e que custam da ordem de  $N \log_2 N$  operações para cada dimensão, tornando o cálculo da energia dipolar de  $O((N \log_2 N)^2)$  [66]. Esse custo computacional é diminuído em até 4 vezes utilizando a biblioteca FFTW [67] (abreviação para *Fastest Fourier Transform in the West*) para transformadas de Fourier discretas, que se adapta ao processador específico usado para a simulação, além de possibilitar redes de tamanhos arbitrários.

A forma discreta do ruído branco pode ser obtida observando que na passagem da delta

de Dirac no espaço contínuo ( $\mathbf{x}$ ) para a delta de Krönecker no espaço discreto se dá por:

$$\delta^2(a\mathbf{n} - a\mathbf{n}') = \frac{1}{a^2}\delta^2(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \equiv \frac{1}{a^2}\delta_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}, \quad (2.22)$$

e assim:  $\langle \eta(\mathbf{x}, t)\eta(\mathbf{x}', t') \rangle = \frac{2T}{a^2}\delta(t - t')\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}$ . Nota-se que se uma variável estocástica  $\eta(t)$  tem uma distribuição de probabilidades gaussiana de variância  $\sigma$  e outra variável  $\mu(t)$  tem variância unitária, os dois processos se equivalem por  $\eta(t) = \sqrt{\sigma}\mu(t)$ . Para tratar o ruído branco nas simulações, usa-se um gerador de números aleatórios entre zero e um com uma distribuição de probabilidade uniforme, onde é aplicado um método de transformação para passar a uma distribuição de probabilidades gaussiana de variância unitária [66]. Na prática, a decorrelação espacial (e temporal) do ruído branco é garantida com o uso de um bom gerador de números aleatórios.

Assim, a equação de Langevin (2.15) no espaço discretizado e com parâmetros adimensionais, escrita aproximadamente como na maneira implementada numericamente, é:

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\phi(\mathbf{k}, t) \left[ \mathbf{k}^2 - 1 + \frac{a^2}{\delta}J(\mathbf{k}) \right] + \left[ -\phi^3(\mathbf{x}, t) + \sqrt{\frac{2T}{a^2}}\mu(\mathbf{x}, t) \right]_{\mathbf{k}}^F, \quad (2.23)$$

onde a interação dipolar  $J(\mathbf{k})$  em (2.23) é a transformada de Fourier rápida (FFT) do resultado das somas de Ewald, que são computadas no início da simulação. Embora essa forma do laplaciano na rede seja isotrópica, depois da discretização espacial a interação dipolar não é mais isotrópica para todas escalas espaciais e se torna gradualmente anisotrópica a medida que o vetor de onda se aproxima de  $\pi$ , como pode ser visualizado na Fig. 2.1.

## Método de Integração Temporal

A maneira com que a equação diferencial parcial estocástica (2.23) é integrada ou discretizada temporalmente garante a eficiência (custo computacional) e a confiabilidade dos resultados obtidos (precisão e estabilidade do algoritmo). O algoritmo escolhido deverá ser um compromisso entre esses dois critérios. Em termos gerais, um algoritmo de integração temporal consiste em discretizar a derivada no lado esquerdo da equação (2.23) em passos finitos do tempo  $\Delta t$  e o do campo  $\Delta\phi$ , o que leva a equações algébricas para a mudança em  $\phi$  quando a variável independente  $t$  é aumentada em  $\Delta t$ . Algoritmos que usam mais de uma equação algébrica para determinar essa mudança o fazem para corrigir ou cancelar erros de ordem mais baixa. Geralmente, o número  $n$  de equações determina a ordem do algoritmo, correspondendo a um erro  $O(\Delta t^{n+1})$  na mudança da variável [66].

Por outro lado, um método de integração temporal de ordem  $n$  tem um custo computacional  $n$  vezes menor. Sendo assim, a preferência é por um método seguro de primeira ordem. Por se tratar de uma equação diferencial parcial, a maneira como ambas discretizações do tempo e espaço estão relacionadas afetam a estabilidade do algoritmo. Dentre

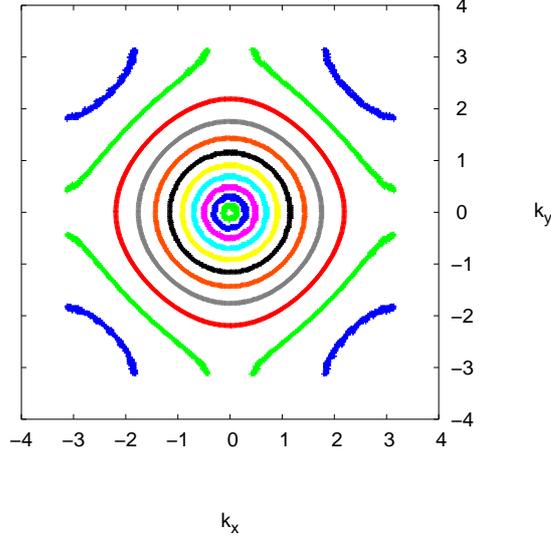


Figura 2.1: Curvas de nível da interação dipolar calculada através das somas de Ewald para uma rede quadrada de tamanho linear  $L = 384$  e constante de rede  $a = 1$ . A interação dipolar começa a se tornar anisotrópica para escalas espaciais  $|\mathbf{k}| > 1$ , enquanto o laplaciano discretizado assume forma circular em todo plano  $(k_x, k_y)$ .

as muitas maneiras de tratar a derivada temporal de primeira ordem frente ao termo difusivo (o laplaciano), o método mais estável recomendado é o semi-implícito, onde o valor do termo difusivo é tomado no tempo posterior  $t + dt$  e a interação dipolar no tempo  $t$ . Para o caso da equação de difusão, esse método é incondicionalmente estável, isto é, é estável para qualquer passo de tempo [66]. No presente caso, o método semi-implícito apresentou uma melhora muito significativa frente ao método de Euler, que é um método explícito de primeira ordem.

Como a discretização temporal do ruído branco se dá pela mesma maneira que no caso espacial (2.22), o método de integração empregado (um *método semi-implícito espectral de primeira ordem*) é descrito pela equação:

$$\begin{aligned} \frac{\phi(\mathbf{k}, t + dt) - \phi(\mathbf{k}, t)}{dt} &= -\phi(\mathbf{k}, t + dt)\mathbf{k}^2 - \phi(\mathbf{k}, t) \left[ -1 + \frac{a^2}{\delta} J(\mathbf{k}) \right] \\ &+ \left[ -\phi^3(\mathbf{x}, t) + \sqrt{\frac{2T}{a^2 dt}} \mu(\mathbf{x}, t) \right]_{\mathbf{k}}^F, \end{aligned} \quad (2.24)$$

e se resume a uma atualização *simultânea* de toda rede dada pela seguinte equação

algébrica:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{k}, t + dt) = & \frac{1}{1 + dt \mathbf{k}^2} \left\{ \left[ 1 - dt - dt \frac{a^2}{\delta} J(\mathbf{k}) \right] \phi(\mathbf{k}, t) \right. \\ & \left. + \left[ -dt \phi^3(\mathbf{x}, t) + \sqrt{\frac{2Tdt}{a^2}} \mu(\mathbf{x}, t) \right]_{\mathbf{k}}^F \right\}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

com o ruído gaussiano de variância unitária:  $\langle \mu(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$  e  $\langle \mu(\mathbf{x}, t) \mu(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta_{t,t'} \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}$ . A estabilidade aqui depende essencialmente das constantes de discretização espacial  $a$  e temporal  $dt$  e de que a amplitude do campo  $\phi$  não exceda um valor máximo, o que acaba limitando a intensidade do ruído, isto é, a temperatura. As principais operações da simulação, quanto ao consumo de tempo de processamento, são transformar Fourier o campo  $\phi$  e o termo  $(-\phi^3 + \eta)$  e então transformar de volta o novo valor do campo. Isso possibilita ir a tamanhos relativamente grandes em amostras.

Como veremos nas próximas seções, esse tipo de simulação é capaz de reproduzir grande parte da fenomenologia presente em filmes ultrafinos magnéticos com forte anisotropia uniaxial, justamente pela natureza mesoscópica do modelo. Outros tipos de simulações têm obtido sucesso no intuito de compreender os mecanismos envolvidos nos fenômenos desses sistemas. Por exemplo, a partir da década de noventa, deu-se início a uma intensa investigação das propriedades de equilíbrio e fora de equilíbrio em simulações de Monte Carlo do modelo microscópico de Ising. Elas mostraram um complexo diagrama de fases [22, 68–71] e também se tornaram ferramentas muito importantes na compreensão dos processos dinâmicos que levam o sistema ao equilíbrio [72–75]. De importante relevância para esse trabalho Cannas e colaboradores (2006) [71] observaram fortes evidências da fase "Ising nemática" em simulações de Monte Carlo para o modelo de Ising com interações dipolares, no entanto com um comportamento crítico muito mais complexo que os previstos por Abanov e colaboradores [55]. Contudo, no caso de Ising (variável  $\pm 1$ ) a forma abrupta das paredes de domínio fica numericamente fixada (*pinned*) à rede subjacente, o que induz uma estrutura de padrões um tanto artificial. Por exemplo, a simetria tetragonal da rede numérica domina completamente o cenário em redes quadradas. No caso de simulações de Monte Carlo do modelo de Heisenberg as simulações são muito úteis para investigar o papel da anisotropia perpendicular e oferecem uma ferramenta importante para a determinação do diagrama de fases na região onde ocorre a transição de reorientação de spins [22]. Ainda assim, no que concerne a estrutura de padrões de magnetização, ambos casos de simulações de Ising e Heisenberg estão limitados a tamanhos pequenos.

Neste trabalho é introduzido um modelo com a intenção de fazer uma conexão entre os realísticos porém custosos modelos de Heisenberg e os modelos de Ising que são muito mais simples e ainda não são apropriados para a compreensão da diversidade de estruturas magnéticas presentes em filmes ultrafinos com anisotropia perpendicular. Além disso, o modelo introduzido aqui admite tratamentos tanto numéricos quanto analíticos, o que

torna possível construir um cenário mais compreensível para os comportamentos de equilíbrio e dinâmico dos filmes ultrafinos com anisotropia perpendicular [10, 76]. Na próxima seção apresentaremos algumas análises numéricas do estado fundamental e uma situação em que conseguimos observar a dependência da largura da faixa com a temperatura.

## 2.3 Estado fundamental e a largura das faixas

Nesta seção, além de resultados para simulações a temperatura finita, apresentaremos algumas características do estado fundamental, que podem ser analisados em simulações a temperatura nula, com as condições iniciais apropriadas. O estudo das soluções a temperatura nula também serve de preparação para as simulações em temperatura finita, como a sintonia dos parâmetros relevantes  $\delta$  e  $a$  para selecionar:

1. o mínimo  $k_m$  do espectro de flutuações;
2. o valor negativo do espectro de flutuações  $A(k_m)$ , e por consequência o vetor de onda do estado fundamental  $k_0$ , modificado pelas contribuições dos harmônicos ímpares.

A metodologia empregada para sintonizar esses parâmetros parte da análise visual do espectro de flutuações em um caso específico  $a = 1$ . O vetor de onda  $k_m$  é diretamente selecionado pela força relativa entre as interações  $\delta$ , enquanto o número de modos estáveis no espectro de flutuações ( $A(k) < 0$ ), pela constante de rede  $a$ . Essa por sua vez tem uma relação direta, dada pelas transformações adimensionais na equação (2.13), com a profundidade do estado fundamental, ou a magnitude da temperatura de transição dada pelo valor constante e positivo de  $r = -|r_0|$ . Esse procedimento para o ajuste dos parâmetros é ilustrado na Fig. (2.2) no caso  $\delta = 15$  em uma rede de tamanho linear  $L = 384$  para dois diferentes casos de profundidade do estado fundamental: o caso "raso" onde apenas modos muito próximos de  $k_m$  possuem  $A(k) < 0$ , e o caso "profundo", onde muitos modos são estáveis.

Com a equação de Langevin na sua forma dimensionalizada, o valor de  $k_m$  é selecionado pela força relativa entre as interações  $\delta$ , e essa relação permanece para o caso adimensional. No entanto, a profundidade do espectro de flutuações para o modelo em sua forma dimensionalizada pode ser diretamente relacionada ao valor aditivo  $-r$  onde, se  $r > k_m^2 + J(k_m)/\delta$ , então a solução que minimiza a energia do sistema será uma solução modulada  $\phi(\mathbf{x}) = \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x})$ ; caso contrário, se  $r < k_m^2 + J(k_m)/\delta$ , a única solução é a trivial  $\phi = 0$ . Depois da passagem para a forma adimensional, como se pode notar pelas forma das transformações (2.13) esse papel de  $r$  na estabilidade das soluções moduladas fica atribuído à constante de rede  $a$ . O procedimento que seguimos para a escolha apropriada dos parâmetros  $\delta$  e  $a$  é analisar a parte variável da função  $A(k)$  no caso  $a = 1$ ,

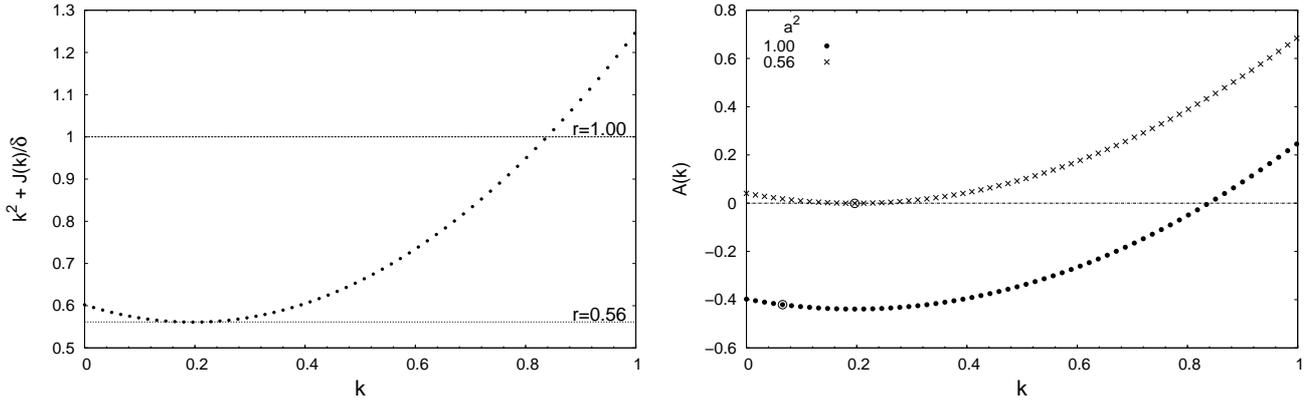


Figura 2.2: À esquerda mostramos a contribuição das interações para o espectro de flutuações para o caso  $\delta = 15$  e  $a = 1$ , que possui um mínimo em  $k_m = \pi/16 \simeq 0.19$ , para tamanho linear do sistema  $L = 384$ . Nesse caso selecionamos a profundidade, e por consequência o número de modos estáveis, através do parâmetro  $r$ . Dois casos estão apontados: "raso" com  $r = 0.56$ , e "profundo" com  $r = 1.00$ . À direita mostramos o espectro de flutuações completo com os parâmetros já adimensionalizados, onde  $a^2 = r$  assim como escrito na equação (2.20). Ali observamos a porção do espectro de flutuações que é negativa. Os pontos circulados correspondem ao valor do vetor de onda  $k_0$  do estado fundamental.

selecionando a profundidade pelo parâmetro  $r$  e em seguida passar a forma adimensional:  $a = r^{1/2}$  e  $\delta = r^{1/2}\delta$ . Para os dois casos apontados na Fig. 2.2, analisamos as condições iniciais de faixas paralelas com uma modulação senoidal para todos vetores de onda  $2\pi n/L$  da rede e, depois de um número seguro de passos de tempo (usamos  $dt = 0.5$ ), obtivemos as energias estacionárias de cada modo. O resultado é que o vetor de onda  $k_0$  que minimiza a energia no caso  $a^2 = 0.56$  é o mesmo do mínimo de  $A(k)$ :  $k_0 = k_m = \pi/16$ . Para o caso profundo  $a^2 = 1.00$  obtivemos  $k_0 = \pi/48$ . Esses valores para o estado fundamental estão circulados em cada caso na Fig. 2.2 e condizem com a análise de campo médio discutida no capítulo anterior.

Como esperado, se visualizarmos o perfil do campo  $\phi(\mathbf{x})$  na direção da modulação observaremos a distinção entre os dois casos: no estado fundamental raso a solução é tipo cosseno e possui a contribuição apenas do modo  $k_0 = k_m$ ; para o caso profundo o perfil é uma onda mais quadrada, com a contribuição de todos harmônicos ímpares do vetor de onda característico  $k_0$ . Essas distinções entre os casos raso e profundo pode ser visualizado na Fig. 2.3, onde também podemos notar que a amplitude da modulação difere muito nos dois casos, já que, pelo menos em aproximação de modo único, a amplitude do modo característico da modulação deve ser proporcional a  $\sqrt{-A(k_0)}$ .

É interessante observar que a forma que as paredes de domínio apresentam no caso profundo são muito diferentes das encontradas nos modelos de Ising sem interação dipolar, ou das convencionais paredes de Bloch e Néel que dividem domínios em ferromagnetos de

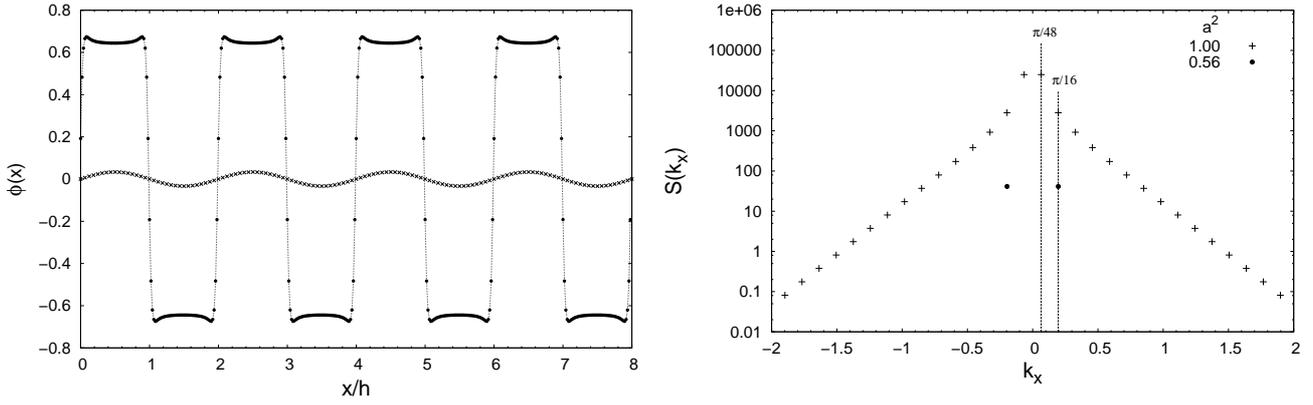


Figura 2.3: O perfil do campo dos estados fundamentais para os casos raso ( $a^2 = 0.56$ ) e profundo ( $a^2 = 1.00$ ) é mostrado à esquerda, onde podemos observar a diferença na forma e na magnitude da modulação. Para fins de comparação, a distância foi dividida pela largura da faixa  $h = \pi/k_0$ . À direita está a componente do fator de estrutura  $S(\mathbf{k}) \equiv |\phi(\mathbf{k})|^2/L^2$  na direção da modulação em escala log-linear, que fornece a contribuição de cada modo ao estado fundamental. Aqui fica evidente a solução modo único para o caso raso, e a contribuição no caso profundo dos harmônicos ímpares  $3\pi/48$ ,  $5\pi/48$ , etc.

Heisenberg típicos. Esse "ombro" pronunciado, que caracteriza uma deslocalização das paredes de domínio, foi observado experimentalmente em filmes de Fe sobre Cu(100) por Vindigni e colaboradores (2008) [31] em regimes de baixas temperaturas (10 K). Como apontado nesse trabalho, essa forma das paredes de domínio é uma característica do caso Ising dipolar apresentado apenas em duas dimensões. Essa característica ressalta a relevância desse modelo no contexto dos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular. Sendo assim, nos resultados apresentados de agora em diante, sempre consideraremos valores dos parâmetros  $a$  e  $\delta$  que correspondam a estados fundamentais profundos. A seguir serão apresentados resultados do efeito de temperatura sobre o estado fundamental do caso  $\delta = 15$  e  $a = 1$ , com especial atenção à dependência da largura da faixa com a temperatura.

### Largura das faixas

Como foi discutido na seção 1.3, a contribuição dos harmônicos ímpares leva a modificar o vetor de onda característico  $k_0$  da modulação para valores menores que o mínimo do espectro de flutuações  $k_m$ . Esse efeito já pode ser observado nos casos analisados nas figuras Fig. 2.2 e Fig. 2.3. Essa dinâmica a temperatura zero é exatamente a dinâmica na aproximação em campo médio, onde  $r$  mediria a distância para a temperatura de transição e  $H$  seria a energia livre do sistema. No entanto estamos considerando a equação de Langevin (2.9) justamente como uma dinâmica governada pela minimização da energia

efetiva  $H$  frustrada pelo efeito do ruído térmico, a fim de explorarmos todas excitações que o sistema pode comportar. Nesse caso o valor negativo de  $A(k_0)$  equivale à distância do estado fundamental para a temperatura de Curie. Nessa seção vamos analisar o efeito das flutuações ao estado fundamental do caso profundo  $\delta = 15$  e  $a = 1$  a fim de observar a dependência  $k_0(T)$ .

As simulações são feitas para um tamanho  $L = 384$  usando passos de tempo  $dt = 0.5$  para valores de temperatura entre  $0.0 < T < 0.7$ . O sistema é inicializado em  $T = 0.7$  e é resfriado lentamente a uma taxa  $d_T$ . A cada temperatura de interesse, o processo de resfriamento é paralisado, onde ao sistema é permitido evoluir  $n_t$  passos de tempo, tal que esteja em equilíbrio com o banho térmico, para depois serem coletadas amostras a cada  $n_m$  passos de tempo, tal que as medidas sejam decorrelacionadas. Como veremos logo adiante, os resultados obtidos nesta seção se baseiam no comportamento do sistema na fase desordenada, acima de qualquer fase de baixas temperaturas e os tempos necessários para obtenção dos dados de equilíbrio são muito pequenos, variando entre  $n_t = 100$ ,  $n_m = 220$  e  $d_T = 10^{-4}$  para temperaturas maiores que  $T = 0.27$ , e  $n_t = 32000$ ,  $n_m = 2000$  e  $d_T = 10^{-6}$  para temperaturas entre  $0.2 < T < 0.27$ . Para temperaturas menores que  $T = 0.2$  os valores utilizados  $n_t$  e  $n_m$  foram de uma a duas ordens maiores, entretanto nessa região de baixas temperaturas não podemos garantir que o sistema esteja em equilíbrio térmico. Foram utilizadas 500 amostras para as médias estatísticas em temperaturas acima de  $T = 0.35$ , 200 para o intervalo  $0.27 < T < 0.35$ , 100 para o intervalo  $0.2 < T < 0.27$ . Em geral, para temperaturas abaixo desse valor foram utilizadas da ordem de 10 amostras para o cálculo das médias.

Para caracterizar  $k_0(T)$  faremos medidas de equilíbrio em diferentes temperaturas do módulo do vetor de onda para qual o fator de estrutura tem seu máximo:

$$k_{max} = \left\langle \left| \max_{\mathbf{k}} S(\mathbf{k}) \right| \right\rangle. \quad (2.26)$$

Essa quantidade fornece uma boa estimativa do período característico da modulação  $k_0$ , independente da orientação das faixas. A média  $k_{max}$  é obtida calculando seu valor para cada configuração e depois fazendo uma média sobre amostras para uma dada temperatura.

Na seção 1.3 obtivemos uma expressão para a dependência do vetor de onda característico na aproximação de campo médio incluindo a contribuição do primeiro harmônico ímpar. A expressão obtida foi:

$$k_0(T) = k_m - \frac{r_0^2}{6a_2^2 k_m^3}, \quad (2.27)$$

onde  $r_0 \propto T - T_{k_0}$  e  $T_{k_0}$  é a temperatura de Curie modificada com a inclusão da interação dipolar, e  $a_2$  é o parâmetro que mede a curvatura do espectro de flutuações. Na figura Fig. 2.4 mostramos os resultados para  $k_{max}$  assim como o ajuste dado pela dependência

quadrática de (2.27). O ajuste foi feito fixando o valor conhecido  $k_m \simeq 0.197$  e a dependência quadrática com a temperatura se mostrou em acordo com os dados na região de temperaturas acima de  $T = 0.13$ .

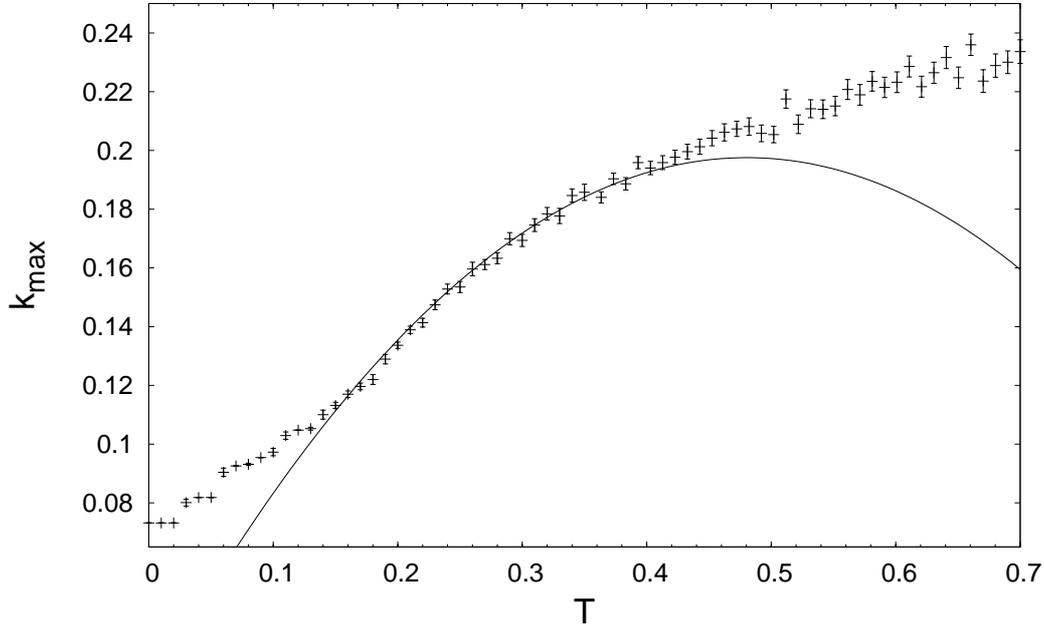


Figura 2.4: Gráfico de  $k_{max}$  em função da temperatura, onde a linha sólida corresponde a um ajuste por  $k_0(T) = k_m - b(T - T_{k_0})^2$  correspondendo a forma funcional dada pela equação (1.43). Os valores obtidos pelo ajuste são de  $T_{k_0} = 0.48$  e  $b = 0.79$ , usando  $k_m = \pi/16$ .

O valor obtido para a temperatura de Curie foi de  $T_{k_0} = 0.48$ . Para verificarmos a consistência desse ajuste devemos procurar por quantidades que indiquem quando se dá a "transição" para o estado paramagnético associado à  $T_{k_0}$ . Na verdade, essa não é uma transição de fases, já que abaixo do estado paramagnético as faixas possuem magnetização global nula e portanto não ocorre nenhuma quebra de simetria. A temperatura de Curie deve ser quando o sistema sofre flutuações térmicas suficientes para que o campo  $\phi$  não distinga mais a forma de duplo poço do potencial local favorecendo dois valores para o campo, de um poço único centrado em zero. Isso pode ser acompanhado observando a distribuição de probabilidades do campo  $P(\phi)$ , que podemos acompanhar através de medidas dos histogramas do campo  $\phi$ . Os histogramas para duas temperaturas são mostrados na figura 2.5. No entanto a análise visual dos histogramas não permite identificar com precisão a passagem entre dois máximos de valores mais prováveis do campo, para um máximo em  $\phi = 0$ . Para contornar esse problema medimos também a variância dessa distribuição, dada por:

$$\langle \phi^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{x}} \phi^2(\mathbf{x}) \right\rangle, \quad (2.28)$$

que deve ter um mínimo na temperatura de Curie. Essa quantidade também pode ser vista na figura 2.5. Os dois resultados corroboram a estimativa de  $T_{k_0} \simeq 0.48$  dada pelo ajuste quadrático.

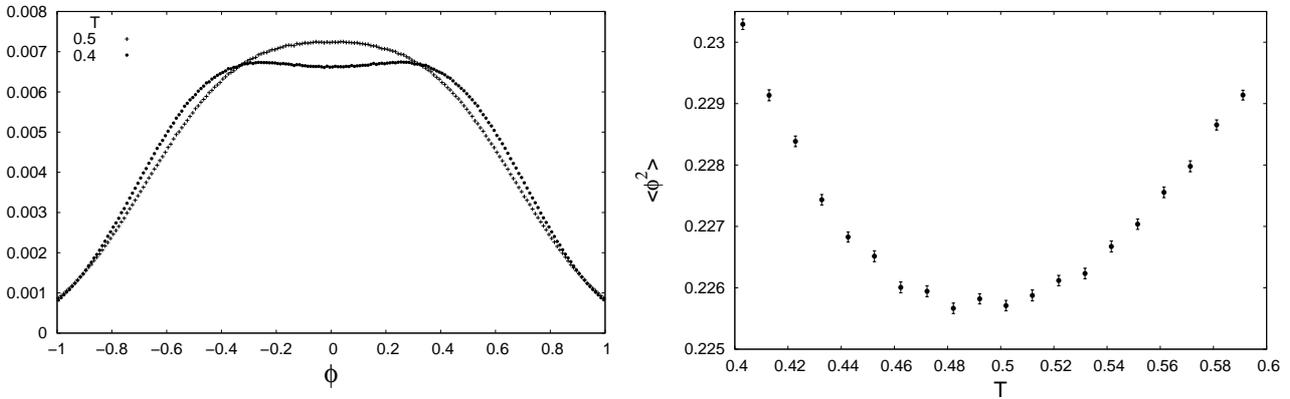


Figura 2.5: À esquerda estão os histogramas do campo  $\phi$  mostrando que a passagem entre uma magnetização polarizada para um estado paramagnético se dá entre  $T = 0.4$  e  $T = 0.5$ . À direita a média do quadrado do campo  $\phi$ , que é uma medida da largura da distribuição do campo e deve ser mínima na temperatura de Curie - que aqui está entre  $T = 0.48$  e  $T = 0.5$  dentro da precisão das medidas.

No caso das simulações de Monte Carlo para os modelos de Ising e Heisenberg desses sistemas nunca foram reportadas na literatura essa dependência da largura das faixas com a temperatura, dadas por  $L(T) = \pi/k_0(T)$ , muito provavelmente devido as suas limitações computacionais aliadas a sua natureza microscópica. Através do modelo dipolar contínuo e as simulações da equação de Langevin associada conseguimos observar não só a dependência  $k_0(T)$ , como verificar que ela é bem descrita pela aproximação de campo médio. Ainda assim, como apontado na seção 1.1, essa dependência com a temperatura ainda é controversa tanto do ponto de vista experimental, quanto teórico [77, 78]. O resultado apresentado aqui está em acordo com a dependência observada experimentalmente por Portmann e colaboradores (2006) [43] para o caso de filmes ultrafinos magnéticos com anisotropia perpendicular de Fe sobre Cu(100), em contraposição à dependência exponencial observada por Won e colaboradores (2005) [18] em filmes de Fe sobre Ni sobre Cu(100). Uma análise mais cuidadosa das propriedades estruturais desses filmes é necessária para estabelecer os limites de aplicabilidade dos nossos resultados.

Podemos analisar visualmente algumas amostras das nossas simulações com a ajuda do aplicativo DynamicLattice da biblioteca de utilidades para análise gráfica LASSPTools. Esse programa permite mapear as configurações da rede quadrada em cores brancas e pretas, correspondendo respectivamente a valores positivos e negativos de  $\phi$ . Essa análise visual permite uma consideração qualitativa e preliminar para as simulações, e tem sua utilidade para determinar a região de parâmetros relevantes para o problema que queremos

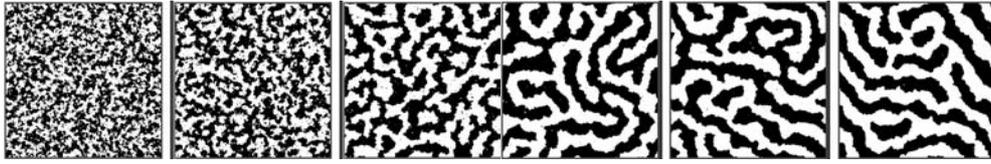


Figura 2.6: Configurações de tamanho  $L = 384$  para o caso  $\delta = 15$  e  $a = 1$ , em um processo de resfriamento a uma taxa de  $d_T = 10^{-6}$  para as temperaturas (da esquerda para direita): 0.4, 0.3, 0.2, 0.15, 0.14 e 0.13.

estudar. Por exemplo, nas simulações apresentadas nessa seção podemos visualizar a dependência da largura das faixas e a aproximação da temperatura de Curie. Algumas configurações para diferentes temperaturas podem ser observadas na figura 2.6. Como podemos notar, a região utilizada para obter a dependência  $k_0(T)$  corresponde a uma fase desordenada de faixas. Estimamos que para esse caso, uma transição para fases de baixas temperaturas deve ocorrer na região  $0.1 < T < 0.2$ . A natureza das fases de baixa temperatura serão o tema da próxima seção.

## 2.4 Fase nemática

Nessa seção apresentaremos resultados obtidos por simulações de Langevin para o modelo dipolar contínuo que confirmam a observação de uma fase intermediária de natureza nemática e se configuram como tema central desta tese. Grande parte dos resultados discutidos aqui foram publicados na revista *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)* [13] - uma cópia da publicação se encontra no apêndice.

Como foi discutido no capítulo anterior, uma das características da fase nemática é que a distância entre os defeitos topológicos que caracterizam sua estrutura de domínios orientacionais depende da temperatura. Portanto, para poder capturar sua estrutura global necessitamos buscar por uma região de parâmetros em que a largura das faixas seja muito menor que o tamanho do sistema. Os valores que julgamos satisfatórios foram para  $\delta = 2\sqrt{5}$ , onde o mínimo do espectro de flutuações é em  $k_m = \pi/3$  que, considerando um estado fundamental profundo com  $a = \sqrt{5}$ , corresponde a um estado fundamental  $k_0 = 1.014 \approx \pi/3$  (ver Fig. 2.7). As simulações foram realizadas para tamanhos  $L = 192$  e  $L = 384$  para temperaturas entre  $0 < T < 0.18$ , onde a integração temporal se mostrou estável usando um passo de tempo  $dt = 0.5$ . Para as simulações apresentadas nesta seção não observamos nenhuma variação no período característico de modulação no regime de temperaturas analisados, principalmente devido a largura da faixa ser muito pequena ( $\sim 3$  sítios).

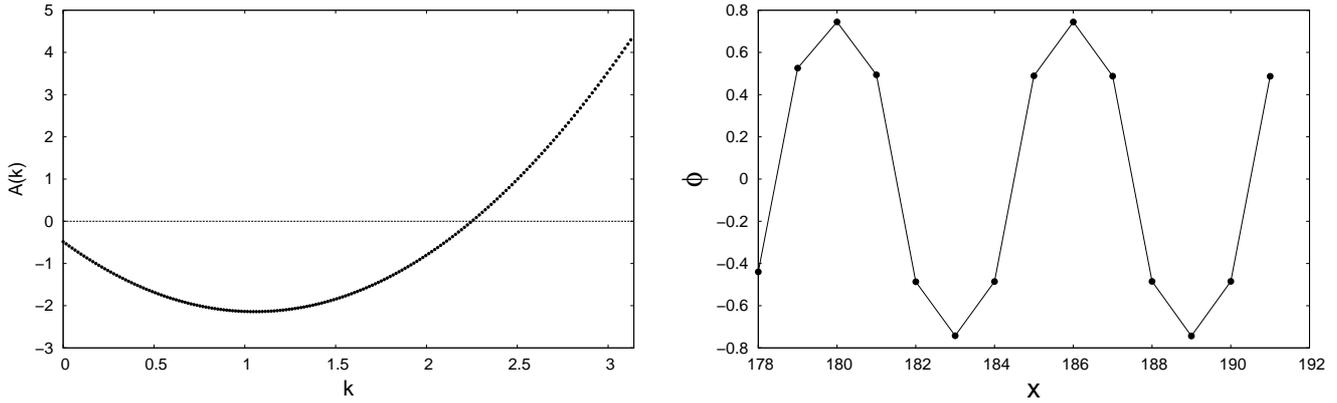


Figura 2.7: À esquerda o espectro de flutuações para o caso  $\delta = 2\sqrt{5}$  e  $a = \sqrt{5}$  e tamanho  $L = 384$ . Em termos gerais, pode-se afirmar que os modos estáveis são os de  $A(k) < 0$ . À direita o campo  $\phi$  em função da posição indicando a amplitude e o período da modulação.

### Procedimento de termalização

Os resultados foram obtidos através do seguinte procedimento de termalização: o sistema é inicializado no estado fundamental e aquecido em uma taxa  $d_T$ . O processo de aquecimento é suspenso ao chegar em uma temperatura de interesse e um transiente de período  $n_t$  passos de tempo é dado para o sistema equilibrar, antes de começar a serem gravadas configurações a cada  $n_m$  passos de tempo. As medidas são realizadas mediando sobre estas configurações.

Para estimar os tempos característicos de transiente ( $n_t$ ) e decorrelação ( $n_m$ ) foram analisados os comportamentos da função de correlação a dois tempos

$$C(t, t_w) = \sum_{\mathbf{x}} \langle \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t_w) \rangle, \quad (2.29)$$

que descreve quantitativamente as propriedades dinâmicas do sistema. Considerando o instante de tempo  $t \geq t_w$ , essa função mede o quanto o sistema se decorrelaciona de si mesmo durante a evolução temporal, ou seja, o quanto ele se afasta no espaço de configurações de seu estado no tempo  $t_w$ . Num procedimento de resfriamento rápido, o sistema é deixado relaxar durante um tempo de espera  $t_w$  e nesse ponto se começam a medir as autocorrelações até um tempo  $t + t_w$ . Se o sistema já atingiu o equilíbrio térmico nesse ponto, então a dinâmica é estacionária e o sistema tem invariância translacional do tempo, isto é  $C(t_w + t, t_w) = C(t)$ , depende só de um tempo. Assim é estimado o tempo transiente para que o sistema termalize. Para estimar o tempo de decorrelação foi observado quanto tempo a função de autocorrelação de equilíbrio leva para ser depreciada de seu valor a tempos iguais ( $C(t_w, t_w) = 1.0$ ), a uma certa fração da correlação, aqui tomada como  $C(t + t_w, t_w) = 0.36$ . Esses valores foram medidos para temperaturas finitas de até  $T = 0.09$ , para temperaturas mais baixas foram usados valores estimados tal que

o sistema esteja o mais próximo possível do equilíbrio. Valores típicos de  $n_t$  estão entre  $5 \times 10^4$  à  $4 \times 10^6$  e os valores de  $n_m$  são da ordem de  $10^5$  passos de tempo. Entre 20 e 60 configurações são utilizadas para efetuar as médias térmicas.

### 2.4.1 Parâmetros de ordem

Como mencionado na seção 1.5, o vetor gradiente de campo  $\phi$ , que é perpendicular à curvatura local da faixa, é o ingrediente fundamental para obtermos um parâmetro de ordem orientacional do sistema. No caso das simulações, para simplificar o tratamento numérico, iremos considerar o vetor diretor:

$$\hat{n}(\mathbf{x}) = \frac{\nabla\phi(\mathbf{x})}{|\nabla\phi(\mathbf{x})|}, \quad (2.30)$$

sendo que o vetor diretor é calculado usando um esquema de diferenças finitas de segunda ordem para o gradiente na rede:

$$\nabla_\alpha\phi(\mathbf{x}) \simeq (\phi(\mathbf{x} - \hat{e}_\alpha) - \phi(\mathbf{x} + \hat{e}_\alpha))/2a, \quad (2.31)$$

onde  $\alpha$  é a componente cartesiana do vetor diretor e  $\hat{e}_\alpha$  é um vetor unitário da rede. Essa aproximação leva em conta apenas os primeiros vizinhos da posição  $\mathbf{x}$ . Agora utilizaremos a definição do parâmetro de ordem nemático dada pela equação (1.46) que leva a definição do parâmetro de ordem tensorial em termos do vetor diretor:

$$Q_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = n_\alpha(\mathbf{x})n_\beta(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}, \quad (2.32)$$

onde  $\alpha, \beta = 1, 2$  são as componentes cartesianas. Como em um cristal líquido, um parâmetro de ordem orientacional  $Q$  pode ser definido como o autovalor positivo da média espacial no tensor acima [9]. Essa definição é muito utilizada em simulações numéricas de cristais líquidos por facilitar a quantificação da parâmetro de ordem orientacional independentemente da orientação média do sistema. No limite termodinâmico, esse valor corresponde à quantidade  $\cos 2\theta$ , onde  $\hat{n} = (\cos\theta, \sin\theta)$  e  $\theta$  é o ângulo entre o campo diretor local e a orientação média do sistema (ver Fig. 2.8). Entretanto, como o vetor diretor dentro das faixas não fornece necessariamente a orientação local, sobretudo a temperatura finita onde a magnetização dentro do domínio sofre flutuações, um valor mais preciso para  $Q$  é obtido mediando somente sobre as posições das paredes de domínio:

$$\bar{Q}_{\alpha\beta} = \frac{1}{L'} \sum_{\mathbf{x}}' Q_{\alpha\beta}(\mathbf{x}), \quad (2.33)$$

onde a linha denota a soma restrita e  $L'$  o número total de sítios que se encontram nas paredes de domínio, isto é, na vizinhança imediata onde o campo  $\phi$  troca de sinal. Agora

é possível escrever explicitamente o parâmetro de ordem orientacional como o autovalor dessa média espacial restrita do tensor nemático:

$$Q = \sqrt{\overline{Q}_{11}^2 + \overline{Q}_{12}^2}. \quad (2.34)$$

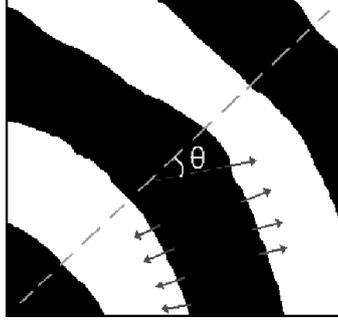


Figura 2.8: ilustração dos vetores diretores e de como eles caracterizam a ordem orientacional através da quantidade  $\cos(2\theta)$ , onde  $\theta$  é o ângulo entre a orientação local e a orientação média global do sistema.

A ordem translacional das faixas se relaciona basicamente com a regularidade da posição das paredes de domínio. Uma das maneiras de caracterizar a ordem translacional das faixas é através de uma magnetização *staggered*, definida como:

$$m_{\mathbf{k}} = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{x}} \text{sgn}(\phi(\mathbf{x})) \text{sgn}(\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})) \right\rangle, \quad (2.35)$$

onde *sgn* é a função sinal e para  $\mathbf{k}$  é usado o vetor de onda do estado fundamental. Uma outra quantidade que medimos foi a energia do sistema. Embora medida com boa precisão pelo número de amostras, ela não mostrou nenhuma assinatura evidente de transições de fase, variando suavemente com a temperatura. Já o calor específico mostrou uma variação muito irregular, sendo necessárias um número de amostras ordens de grandeza maior para obter resultados conclusivos.

As medidas dos dois parâmetros de ordem obtidas nas simulações em tamanho linear  $L = 192$  e  $384$  estão na Fig. 2.9. Esses dois parâmetros de ordem devem ser não nulos apenas quando o sistema apresenta ordem de longo alcance, referente a cada tipo de ordem. No entanto, além dos efeitos de tamanho finito na fase desordenada que é comum a todo tipo de simulações, nos casos em que a ordem é de quase longo alcance um efeito de tamanho finito também deve ser observado nas fases ordenadas.

Os dados indicam claramente uma transição de fases onde os dois tipos de ordem emergem a uma temperatura finita. Para  $L = 192$ , embora a magnetização *staggered* caia significativamente em  $T = 0.11$ , os dois parâmetros de ordem vão a zero em  $T \approx 0.12$ . Entre essas temperaturas o parâmetro de ordem translacional parece apresentar um forte efeito de tamanho finito. À medida que a temperatura diminui adentro na fase ordenada,

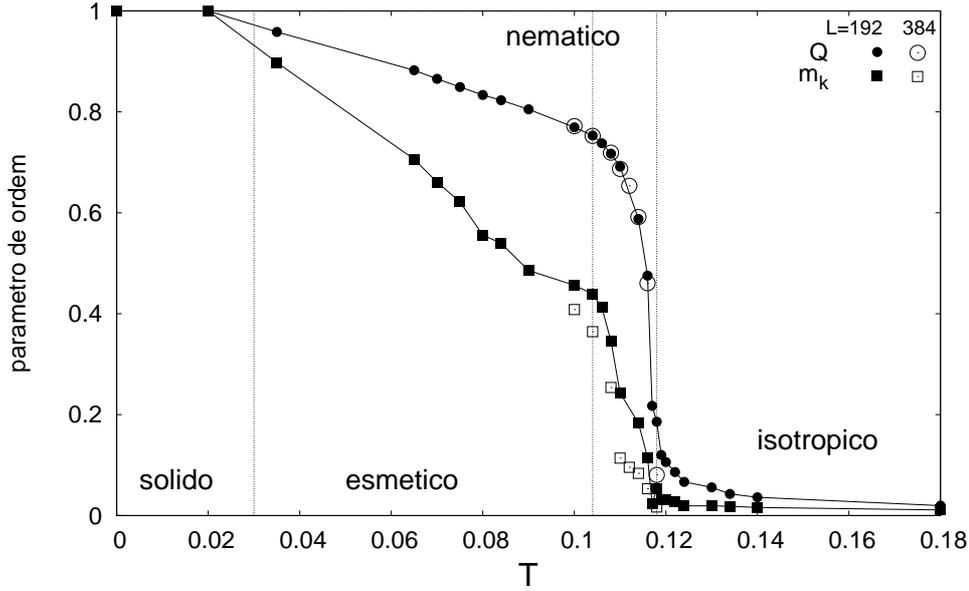


Figura 2.9: Parâmetros de ordem em função da temperatura para  $L = 192$ . Os símbolos vazios correspondem ao tamanho maior,  $L = 384$ . As linhas verticais separam aproximadamente os diferentes regimes observados, distinguidos pelas funções de correlação espaciais, que serão discutidas a seguir.

uma estrutura de faixas se estabelece gradualmente através da aniquilação de defeitos. Isso ficará mais evidente logo adiante, quando faremos uma análise visual das configurações. Através das medidas dos parâmetros de ordem, podemos calcular as susceptibilidades pelas suas respostas lineares:

$$\chi_{nn} = \frac{L^2}{T} (\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2) \quad (2.36)$$

$$\chi_{\mathbf{k}} = \frac{L^2}{T} (\langle m_{\mathbf{k}}^2 \rangle - \langle m_{\mathbf{k}} \rangle^2), \quad (2.37)$$

usando o vetor de onda do estado fundamental para  $\mathbf{k}$ . As medidas para as simulações de tamanho linear  $L = 192$  são mostradas na figura 2.10. Enquanto os resultados para a susceptibilidade orientacional indicam uma transição clara para uma fase com ordem orientacional, o número de amostras considerados aqui não possibilita fazer uma análise da susceptibilidade do parâmetro de ordem translacional, dado as grandes flutuações. O caso de uma transição de fase associada a  $m_{\mathbf{k}}$ , com base nos dados dos parâmetros de ordem é inconclusiva.

Ao final da seção faremos uma análise mais detalhada da susceptibilidade orientacional. Como a quantidade de dados é insuficiente para analisar a dependência com o tamanho finito perto da transição, já que fizemos simulações de apenas dois tamanhos, não é possível afirmar a estabilidade de uma fase intermediária nemática, com ordem orientacional apenas somente com base nesses dados. Como a dependência da ordem translacional

com o tamanho é mais forte que a orientacional, estes resultados indicam a presença de regiões de temperatura com assinaturas de diferentes fases ou regimes, que podem ser caracterizados por outras medidas mais cuidadosas da ordem subjacente. Como os cenários apresentados no capítulo anterior sugerem diferentes tipos de ordem, como ordens de quase longo alcance caracterizadas pela forma funcional do decaimento das funções de correlação espaciais, vamos a seguir definir tais quantidades para os dois tipos de ordem, assim como sua contrapartida no espaço de vetores de onda.

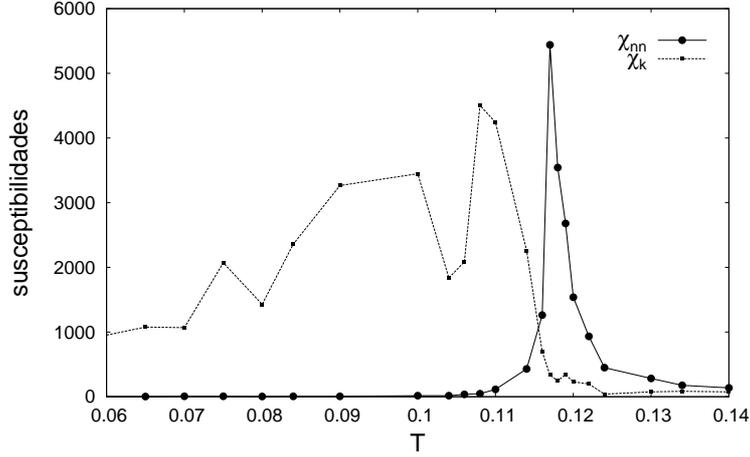


Figura 2.10: Susceptibilidades dos parâmetros de ordem em função da temperatura para  $L = 192$ . O valor máximo para  $\chi_{nn}$  se encontra em  $T = 0.117$ . Para  $\chi_k$  os erros estatísticos, principalmente na região de baixas temperaturas, não possibilitam uma análise quantitativa.

## 2.4.2 Correlações espaciais e fator de estrutura

Tipicamente, as fases nemática e esmética em duas dimensões são caracterizadas pela presença de defeitos topológicos e ordens denominadas de quase longo alcance, isto é, as correlações espaciais decaem algebricamente com a distância, características singulares das transições mediadas por defeitos. Para analisar melhor as propriedades estruturais das diferentes configurações magnéticas, calculamos o fator de estrutura estático:

$$S(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{L^2} \langle |\phi(\mathbf{k})|^2 \rangle, \quad (2.38)$$

e a função de correlação espacial associada:

$$C(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{x}} \langle \phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \rangle, \quad (2.39)$$

que podem ser computadas usando uma transformada de Fourier rápida [67]. Por se tratar de um sistema com ordenamento anisotrópico, as direções relevantes para a função

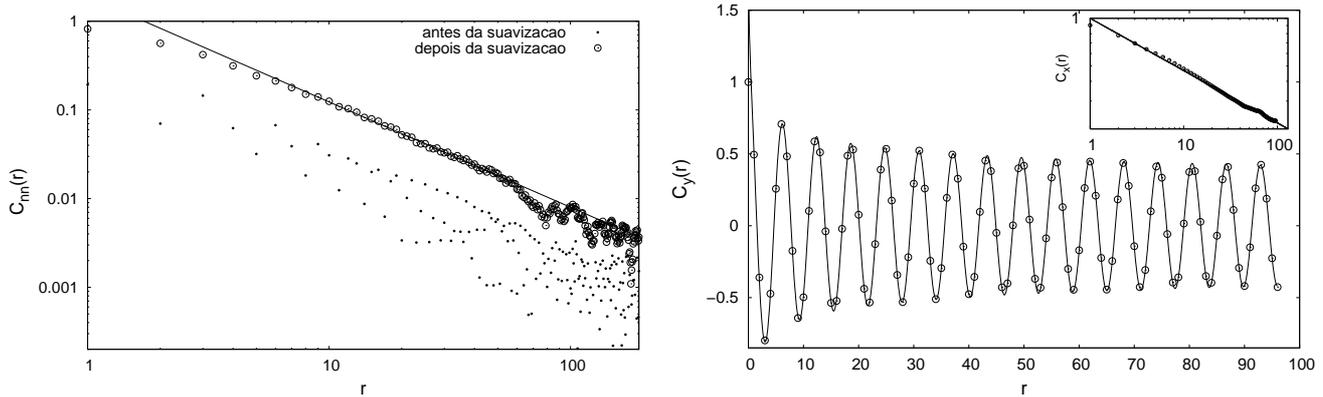


Figura 2.11: Funções de correlação na região esmética em  $T = 0.1$ . A figura à esquerda mostra a função de correlação orientacional na direção perpendicular para  $L = 384$ , mostrada em um gráfico com escala log-log, antes e depois do procedimento de suavização. A linha contínua corresponde a um ajuste pela função  $Ar^{-\alpha_y}$ , com  $\alpha_y = 1.18$  e  $A$  um parâmetro de ajuste. Na direção paralela essa função decai imediatamente a zero. A figura à direita mostra as funções de correlação espaciais paralela (inserção) e perpendicular, ambas para  $L = 192$ . A função paralela  $C_x$  mostrada em escala log-log. As linhas contínuas correspondem a ajustes pelas funções  $r^{-\omega_x}$  e  $\cos(k_0 r)r^{-\omega_y}$ , com  $\omega_x = 0.33$  e  $\omega_y = 0.19$  e  $k_0 = 1.014$ . Valores similares são obtidos no caso  $L = 384$ .

de correlação espacial são as direções paralela e perpendicular às faixas, denotadas por  $C_x$  e  $C_y$ , respectivamente. Estas quantidades descrevem a ordem translacional ao longo das duas direções.

Outra quantidade relevante em termos estruturais é a função de correlação orientacional (ou nemática) [79, 80], que traz informações a respeito do decaimento espacial da orientação das faixas, e é definida como:

$$C_{nn}(\mathbf{r}) = \frac{2}{L^2} \sum_{\mathbf{x}} \langle \text{Tr} Q(\mathbf{x} + \mathbf{r})Q(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.40)$$

$$= \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{x}} \langle Q_{11}(\mathbf{x} + \mathbf{r})Q_{11}(\mathbf{x}) + Q_{12}(\mathbf{x} + \mathbf{r})Q_{12}(\mathbf{x}) \rangle, \quad (2.41)$$

onde a função somada na Eq. (2.40) é análoga a  $\langle \cos [2\theta(\mathbf{x} + \mathbf{r}) - 2\theta(\mathbf{x})] \rangle$ . Cabe mencionar que, ao contrário do caso do parâmetro de ordem  $Q$ , para este caso consideramos todos os sítios da rede para computar seu valor. Nas Figs. 2.11 e 2.14 podemos visualizar exemplos das funções de correlação para duas temperaturas diferentes.

Para temperaturas baixas ( $T < 0.11$ ), as correlações orientacionais são fortemente afetadas pelas oscilações residuais do campo  $\phi(\mathbf{x})$ , como veremos a seguir. Com intuito de obter valores mais precisos para a função de correlação orientacional, é conveniente suavizar o parâmetro de ordem tensorial (2.32) com um procedimento introduzido na Ref. [80], em uma espécie de média ponderada local do parâmetro de ordem. Os campos

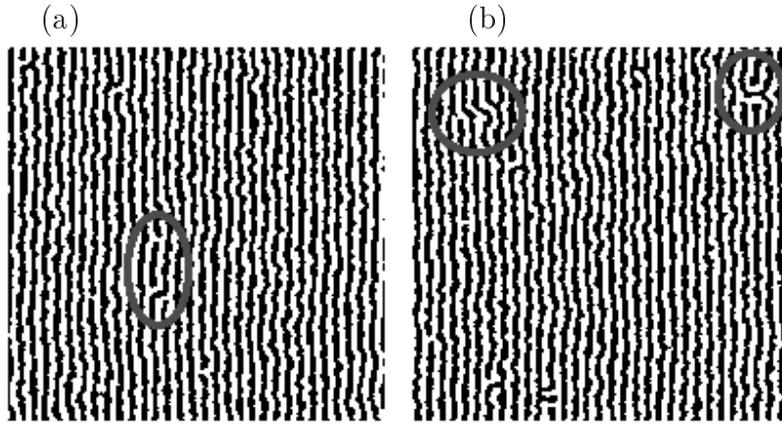


Figura 2.12: Configurações típicas na fase esméctica para  $L = 192$  em (a)  $T = 0.1$  e (b)  $T = 0.104$ . Em (a) a região circulada destaca dois pares de discordância; acima se encontra uma "passagem" devido a duas discordâncias inseridas na mesma faixa, e abaixo um par de discordâncias separadas por uma faixa. Em (b) um par separado por quatro faixas e um par formado por uma discordância com vetor de Burgers maior e uma discordância dupla.

$Q_{11}(\mathbf{x})$  e  $Q_{12}(\mathbf{x})$  são suavizados individualmente usando o seguinte processo iterativo:

$$f_{(n+1)}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}f_{(n)}(\mathbf{x}) + \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{x}' \in NN} f_{(n)}(\mathbf{x}'), \quad (2.42)$$

onde  $f_{(n)}$  é um dos dois campos depois de  $n$  iterações, e  $NN$  significa os quatro primeiros vizinhos de  $\mathbf{x}$  na rede quadrada. Três iterações são suficientes para obter resultados mais claros (Fig.2.11). Para fins de clareza, são sempre calculadas as funções de correlação orientacionais *conectadas*, onde o quadrado da média do parâmetro de ordem orientacional é subtraída da Eq.(2.41), tal que  $C_{nn}$  corresponda somente às flutuações direcionais.

Para temperaturas suficientemente baixas ( $T < 0.03$ ) as correlações espaciais decaem imediatamente a uma constante e, portanto, existe ordem de longo alcance orientacional e translacional. Nesse regime de temperaturas, a flutuação térmica não é suficiente para mudar o sinal do campo  $\phi$ , como podemos avaliar pela grande amplitude dos pontos localizados nas paredes de domínio na solução de faixas apresentada anteriormente na figura 2.7. Nessa região a estrutura de faixas se mantém fixa, caracterizando o regime sólido.

### Regime esméctico

Em uma larga escala de temperaturas,  $0.03 < T < 0.11$ , encontramos evidência de um regime esméctico, semelhante a fase de cristal esméctico predita por Abanov e colaboradores [55] e observada experimentalmente em filmes de Fe sobre Cu(100) por Portmann

e colaboradores [12]. Como discutido ao final da seção 1.6, a estabilidade dessa fase a temperaturas finitas se deve provavelmente a um efeito de discretização da rede numérica. Neste regime, as flutuações de ondulação já são suficientes para causar um decaimento algébrico das correlações translacionais a baixas temperaturas, para  $T > 0.03$ . Porém, em  $T = 0.09$  pares ligados de discordâncias surgem e se tornam mais comuns à medida que a temperatura aumenta. A ordem de longo alcance orientacional é robusta e permanece por uma escala de temperaturas maiores. Acima de  $T = 0.065$  a ordem orientacional também passa a decair algebricamente, no entanto ainda para um valor finito dado pela média do quadrado do parâmetro de ordem  $\langle Q^2 \rangle$  - lembramos que estamos calculando as correlações conectadas. Isso sugere que a ordem orientacional nesse regime sofre um efeito residual do *pinning* numérico que estabiliza a ordem esmética.

Um exemplo do comportamento algébrico das funções de correlação nessa região é mostrado na Fig. 2.11 para  $T = 0.1$ . É importante notar que o expoente do decaimento algébrico translacional nesse regime aumenta com a temperatura e é diferente nas direções perpendicular e paralela - valores dos expoentes variam de  $\omega_x = 0.034$  e  $\omega_y = 0.036$  para  $T = 0.035$  até  $\omega_x = 0.365$  e  $\omega_y = 0.212$  para  $T = 0.104$ . Essa variação dos parâmetros é prevista pelas teorias de transições mediadas por defeitos, embora não tenhamos dados e estatística suficientes para avaliar sua dependência funcional com a temperatura. Com a ordem orientacional de longo alcance se observa uma dependência mais fraca do expoente algébrico com a temperatura na direção perpendicular, com expoentes entre  $1.18 < \alpha < 1.43$ . Na direção paralela, a função de correlação orientacional é uma constante. Esse comportamento das funções de correlação se reflete na forma do fator de estrutura mostrado na figura 2.13, onde se nota a forte ordem orientacional do sistema. Na Fig. 2.12 estão algumas configurações típicas desta fase. Nota-se que ela é caracterizada pelas flutuações de ondulação e uma densidade finita de pares de discordância - alguns tipos diferentes estão destacados.

## Regime nemático

Em uma escala estreita das temperaturas,  $0.11 < T < 0.118$ , onde o parâmetro de ordem orientacional é ainda alto mas a magnetização staggered cai consideravelmente, há uma mudança no comportamento das funções de correlação. Na direção paralela, a ordem translacional se descorrelaciona exponencialmente rápido a zero, indicando ausência de ordem translacional das faixas. Na direção perpendicular, onde a ordem é mais robusta,

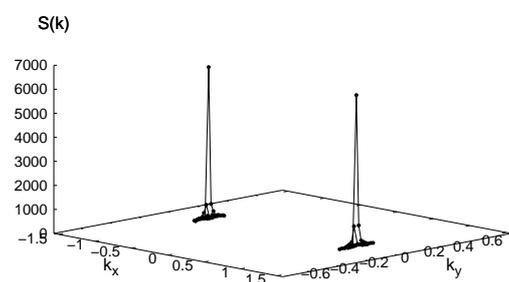


Figura 2.13: Fator de estrutura para o caso esmético em  $T = 0.1$  e  $L = 384$ , onde observamos dois picos de Bragg algébricos pronunciados.

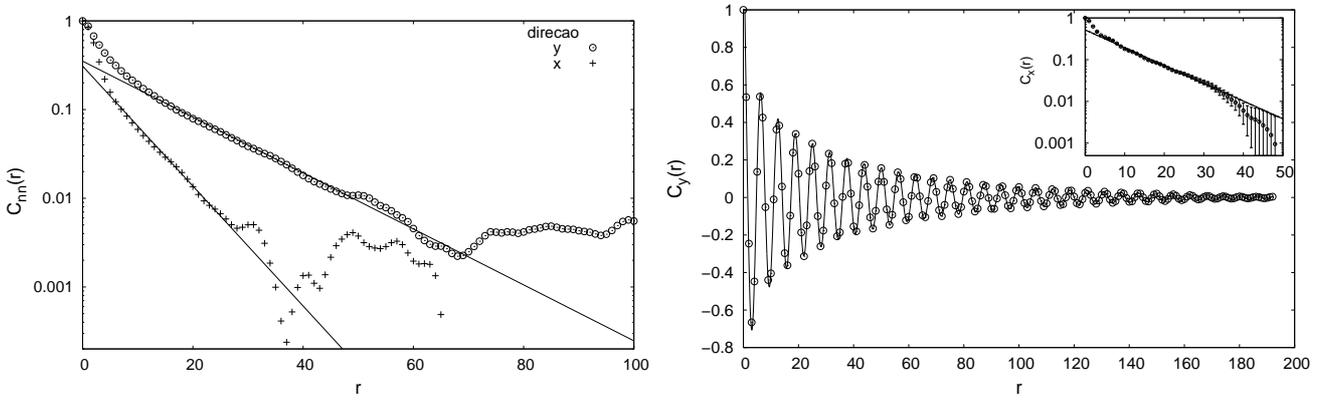


Figura 2.14: Funções de correlação na região nemática para  $T = 0.114$  e  $L = 384$ . A figura à esquerda mostra a função de correlação orientacional conectada nas direções perpendicular e paralela em escala log-linear. As linhas contínuas correspondem a ajustes pela função  $A \exp(-r/\lambda)$ , com  $\lambda_y = 13.77$  e  $\lambda_x = 6.42$ . Na figura à direita estão as funções de correlação translacionais nas direções paralela (inserção) e perpendicular. A função paralela  $C_x$  está mostrada em escala log-linear. As linhas contínuas correspondem a ajustes pelas funções  $A \exp(-r/\xi_x)$  e  $\cos(k_0 r) \exp(-r/\xi_y) r^{-\omega_y}$  com  $\xi_x = 10.17$ ,  $\xi_y = 60.0$  e  $\omega_y = 0.26$  e  $k_0 = 0.98$ .

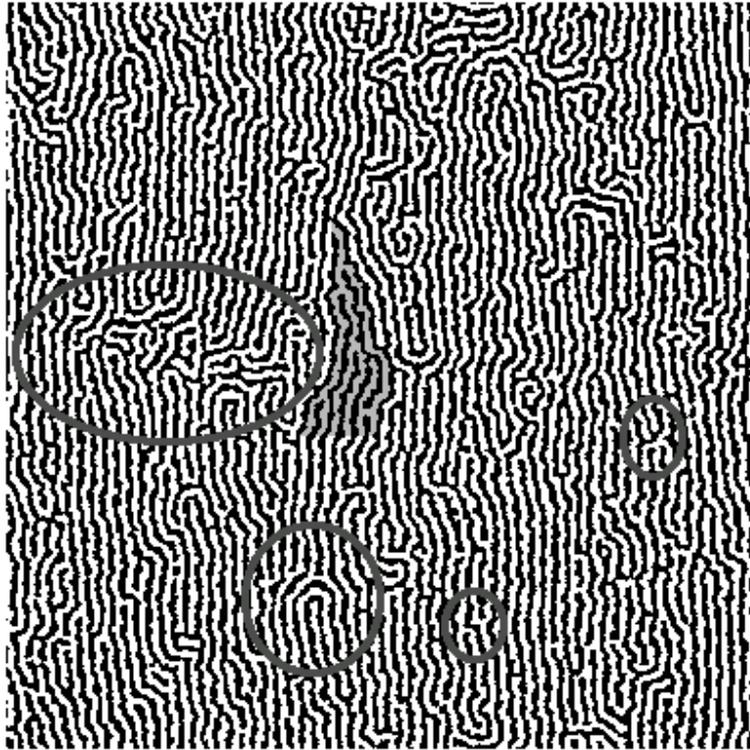


Figura 2.15: Configuração típica de tamanho  $L = 384$  da região nemática para  $T = 0.114$ . Alguns defeitos estão em evidência. Em pequenos círculos, dois pares de discordância dentro de um domínio esméctico; em um círculo maior um dipolo de disclinação; uma série de discordâncias inseridas em uma única faixa está colorida, e em uma elipse um domínio de faixas em orientação perpendicular.

observa-se um comportamento intermediário onde a correlação translacional é melhor descrita pelo produto de uma lei de potência e uma exponencial. Um exemplo desse comportamento pode ser visto na Fig. 2.14. Provavelmente é devido a esse decaimento mais lento da ordem translacional na direção perpendicular às faixas que observamos um valor finito para a magnetização staggered  $m_{\mathbf{k}}$  na figura 2.9. Sendo assim podemos inferir que uma análise quantitativa dos parâmetros de ordem para tamanhos maiores de sistema deve levar a conclusão que esse regime nemático de fato seja uma fase termodinamicamente estável com ordem orientacional apenas. A respeito da natureza da ordem nessa fase, a função de correlação orientacional conectada decai exponencialmente em ambas direções a um valor finito, indicando uma ordem de longo alcance. No entanto o decaimento se dá com diferentes comprimentos de correlação nas duas direções, o que indica que os domínios orientacionais nesse regime são mais largos na direção perpendicular, confirmando a análise discutida na seção 1.6 do capítulo anterior.

Analisando visualmente as configurações, observam-se muitos tipos de excitação corrompendo a ordem orientacional. Uma configuração típica pode ser vista na Fig. 2.15. Esse regime apresenta grandes discordâncias formadas por mais de uma faixa (com o vetor de Burgers maior), que podem ser consideradas como um par ligado de disclinações de carga oposta. Pequenos domínios de orientação perpendicular (circulados em Fig. 2.15) também estão presentes e se tornam maiores e mais comuns a medida que a temperatura aumenta. Semelhantemente aos experimentos em filmes ultrafinos magnéticos com anisotropia perpendicular, não encontramos evidências para as "paredes de domínio de faixas" previstas por Abanov e colaboradores [55], mesmo embora a forma dos domínios sugira que a anisotropia tetragonal ainda exerça influência no sistema.

Cercados por defeitos topológicos orientacionais, observam-se domínios de faixas que são localmente esméticos, onde a ordem é descorrelacionada principalmente por flutuações de ondulação e pares de discordâncias (alguns circulados na Fig. 2.15). Podemos notar que isso está em acordo com a imagem construída por Toner e Nelson [11] para a fase nemática no âmbito das aproximações elásticas, já que observamos domínios nemáticos anisotrópicos, onde a única diferença é a presença de pares de discordância no interior desses domínios. Aqui também cabe ressaltar a diferença da ordem esmética local nesse regime com o regime anterior. Nesse caso os diferentes tipos de pares de discordâncias no interior dos domínios nemáticos perdem a geometria rígida encontrada no regime esmético, indicando que na região nemática os domínios de faixas sofrem menor influência da rede, em acordo com os resultados experimentais de filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular [12], mencionados ao final do capítulo anterior, onde a ordem orientacional desacopla os domínios da rede formando uma espécie de sólido flutuante (*floating solid*).

Como mencionado na seção 1.5, a estabilidade de uma fase nemática a temperaturas finitas pode ser interpretada como uma condensação quadrupolar. A fim de compararmos

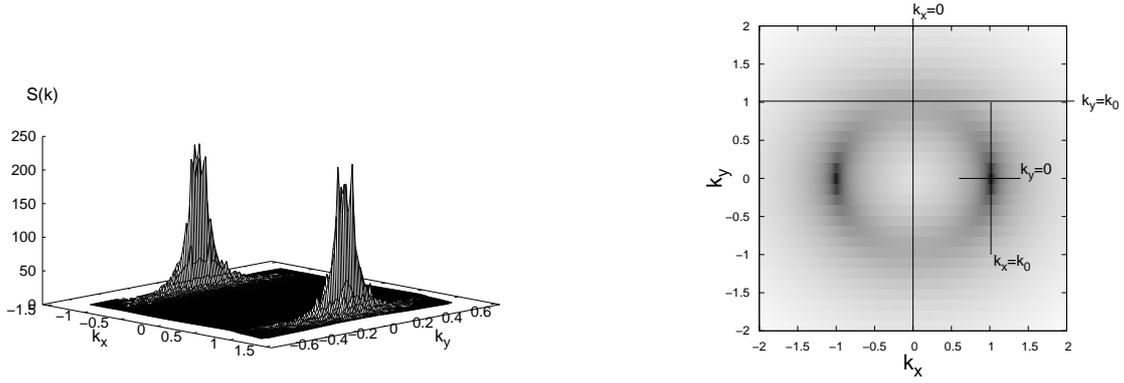


Figura 2.16: À esquerda o fator de estrutura espacial no regime nemático para  $T = 0.114$  e  $L = 384$  e a direita sua projeção no plano  $(k_x, k_y)$ . Observamos que os máximos são suavizados em relação ao regime esmétrico pelas flutuações angulares, e a ausência da ordem translacional se traduz na forte diminuição do valor dos máximos de  $S(\mathbf{k})$ . Na projeção no plano as intensidades mais escuras correspondem aos valores mais intensos do fator de estrutura, onde foi utilizada uma escala logarítmica para evidenciar a forma circular das flutuações angulares. As linhas traçadas sobre o gráfico indicam os cortes utilizados aqui para visualizar a comparação dos dados com a equação (2.43) através do ajuste pela função (2.44).

os resultados previstos por Barci e Stariolo [10, 50] para a estabilidade da fase nemática em modelos da classe de Brazovskii, calculamos o fator de estrutura para  $T = 0.114$  e  $L = 384$ . O fator de estrutura para as simulações pode ser visualizado na figura 2.16, onde observamos claramente o papel das flutuações angulares em torno da direção preferencial. A comparação é feita através de um ajuste numérico tridimensional em todo o plano  $(k_x, k_y)$ . A predição teórica e a função de ajuste são dadas por:

$$S(\mathbf{k}) = \frac{T}{r + a_2(k - k_0)^2 - \alpha k^2 \cos(2\theta)u_2} \quad (2.43)$$

$$f(k_x, k_y) = \frac{T}{r + a_2(\sqrt{k_x^2 + k_y^2} - k_0)^2 - q(k_x^2 + k_y^2) \cos(2(\tan^{-1}(k_y/k_x) - \theta_0))} \quad (2.44)$$

Mantendo fixo o valor da temperatura em  $T = 0.114$ , o ajuste tridimensional convergiu para os seguintes valores:

$$r = 0.0547 \quad (2.45)$$

$$a_2 = 1.3278 \quad (2.46)$$

$$k_0 = 0.9660 \quad (2.47)$$

$$q = -0.0557 \quad (2.48)$$

$$\theta_0 = 1.5688. \quad (2.49)$$

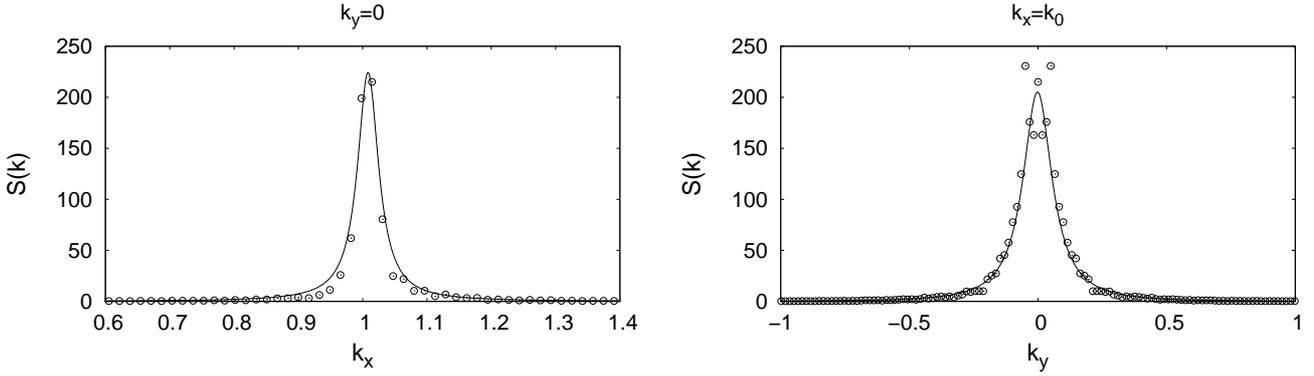


Figura 2.17: Gráficos para a região em torno do máximo de  $S(\mathbf{k})$ . À esquerda está o corte em  $k_y = 0$ , onde observamos a difusão posicional de  $S(\mathbf{k})$ . À direita o corte em  $k_x = k_0$ , onde observamos as flutuações angulares de  $S(\mathbf{k})$ . Em ambos os casos a função (2.44) se ajusta muito bem aos dados.

É interessante notar que o parâmetro de ajuste  $q$  é negativo, o que confere com as previsões teóricas da seção 1.5, já que este corresponde ao produto da amplitude do parâmetro de ordem nemático com a intensidade da interação quadrupolar, que deve ser negativa (atrativa) para a fase nemática ser estável. Através de uma análise visual, observamos que a função (2.44) se ajusta muito bem aos dados, inclusive nas regiões distantes aos picos do fator de estrutura. Para análise visual, aqui mostramos quatro cortes bidimensionais que estão indicados em Fig. 2.16. Na figura 2.17 estão as comparações para as regiões próximas e sobre o pico do fator de estrutura, e na figura 2.18 as comparações são feitas para as regiões de menor intensidade, mostrando que a função  $f(k_x, k_y)$  se ajusta bem aos dados não só para as regiões dominantes. Esse resultado reforça a análise apresentada na seção 1.5 de que as flutuações térmicas, em sistemas bidimensionais com interações competitivas, renormalizam as interações do sistema na forma de interações multipolares efetivas com simetria nemática.

### Fase isotrópica

Para estimar a temperatura de transição  $T_c$  entre as fases com ordem orientacional e a isotrópica, são medidos o comprimento de correlação orientacional, obtido via ajustes exponenciais da função de correlação orientacional, e a susceptibilidade de  $Q$  obtida pela equação (2.37) na fase isotrópica. Os resultados para  $L = 192$  podem ser vistos na Fig. 2.20, onde os dados são bem ajustados por leis de potência (que indicam que  $T_c \approx 0.117$ ). Esse ajuste entra em desacordo com a divergência exponencial esperada para uma transição KT mediada por disclinações, discutidas no capítulo anterior. No entanto, se observarmos o fator de estrutura na vizinhança ( $T = 0.118$ ) da transição na figura 2.19

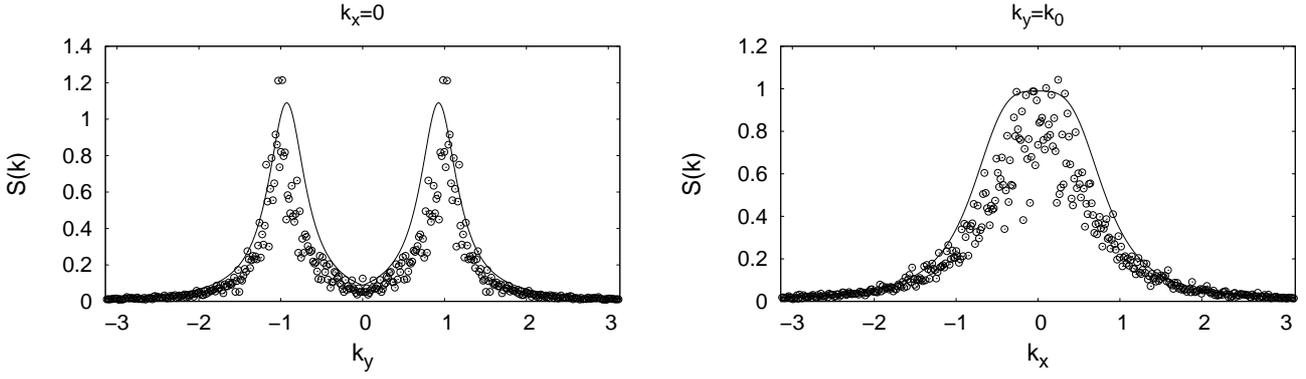


Figura 2.18: Gráficos para as regiões menos intensas de  $S(\mathbf{k})$ . À esquerda está o corte em  $k_x = 0$ , e à direita o corte em  $k_y = k_0$ , onde observamos que a função (2.44) se ajusta bem aos dados em todo plano  $(k_x, k_y)$ . Observem as escalas de grandeza dos dados nessa região, em comparação com a figura 2.17.

percebemos que os efeitos da anisotropia da rede quadrada são dominantes, no entanto não a ponto de induzir uma transição da classe de universalidade de Ising - as flutuações angulares também estão presentes e se espalham pelo anel de vetor de onda preferencial  $|k_0| \simeq 1.01$ . Os expoentes críticos obtidos não permitem uma análise segura da classe de universalidade da transição isotrópico-nemática - para tanto seriam necessárias análises de escalonamento de tamanho finito e um conjunto de amostras suficiente para uma boa estatística [81]. Por outro lado eles podem ser uma razoável estimativa inicial para uma análise mais segura. Ainda assim, a análise visual do fator de estrutura para  $T = 0.118$  indica a possibilidade da transição se enquadrar na classe de modelos não universais  $XYh4$ , onde a transição não é nem a transição de KT para sistemas isotrópicos, nem a transição de Onsager-Ising para anisotropias tetragonais muito intensas.

À medida que a temperatura aumenta, flutuações angulares em torno destas duas direções preferenciais espalham os quatro picos e o sistema se torna quase isotrópico, e o peso espectral do fator de estrutura cai sobre um anel e tem uma forma levemente tetragonal (Fig. 2.19). Uma configuração típica ilustrando a simetria fracamente tetragonal da fase desordenada logo acima da transição pode ser vista na Fig. 2.21. Perto da transição a fase isotrópica ainda apresenta o comportamento exponencial-algébrico nas correlações translacionais, assim como no regime nemático, indicando que essa fase localmente se assemelha à fase de baixas temperaturas. A característica anisotrópica da função de correlação orientacional desaparece nessa fase, onde  $C_{nn}$  decai exponencialmente a zero.

### Considerações finais

Nesta seção apresentamos resultados de equilíbrio para as simulações de Langevin do

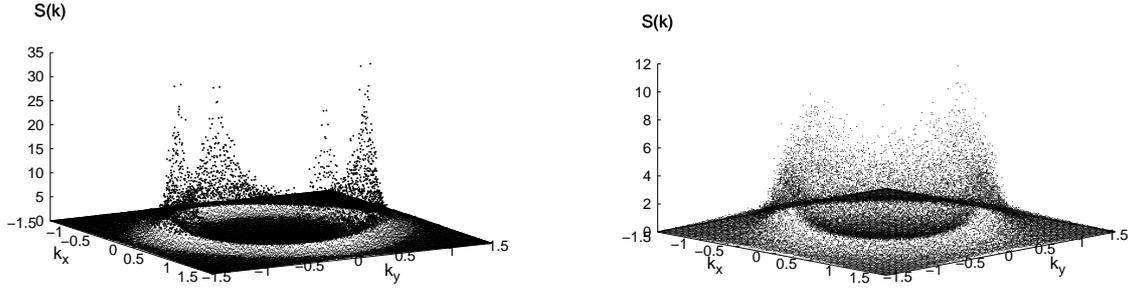


Figura 2.19: Fatores de estrutura para as temperaturas 0.118 (esquerda) e 0.14 (direita). Muito próximo da temperatura de transição ( $T = 0.118$ ), observamos o papel da anisotropia tetragonal induzida pelo *pinning* da rede, que no entanto não é dominante - as flutuações angulares estão distribuídas pelo anel de raio  $|k_0| \simeq 1.01$ . Na fase isotrópica ( $T = 0.14$ ) observamos que a simetria orientacional é restaurada, embora a forma do fator de estrutura ainda possua uma forma levemente tetragonal.

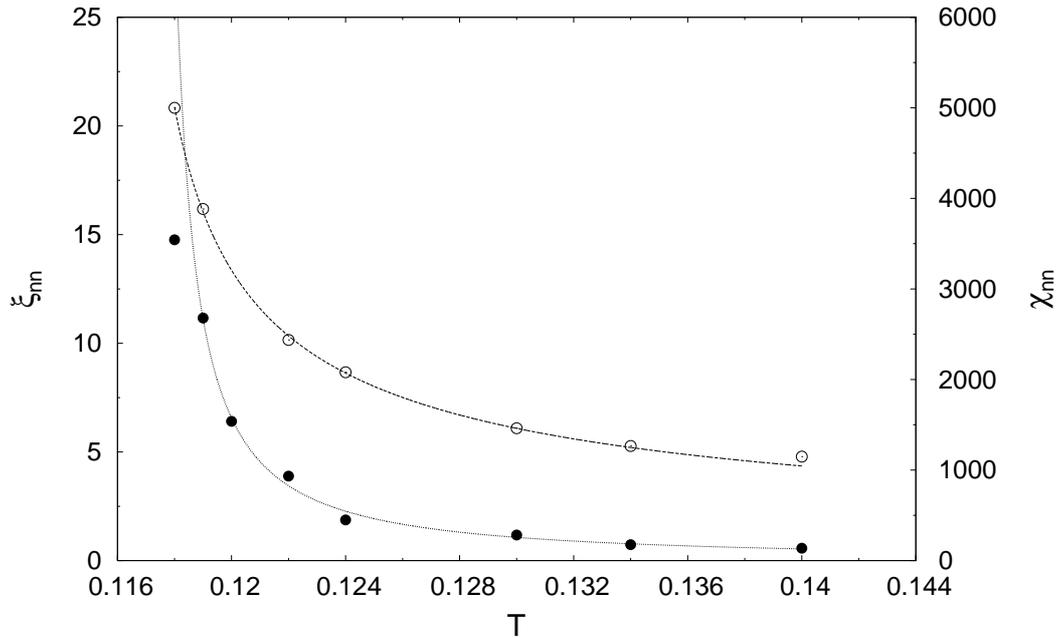


Figura 2.20: Comprimento de correlação orientacional (símbolos cheios) e a susceptibilidade (símbolos vazios) em função da temperatura na fase isotrópica. As linhas correspondem aos seguintes ajustes por leis de potência:  $\chi_{nn}(T) \sim (T - 0.1172)^{-1.19}$  e  $\xi_{nn}(T) \sim (T - 0.1161)^{-0.61}$ .

modelo dipolar contínuo. A escolha dos parâmetros em  $\delta = 2\sqrt{5}$  e  $a = \sqrt{5}$ , correspondendo a faixas de largura pequena, possibilitaram observar em escala global as estruturas magnéticas dos domínios de faixas em diferentes regimes de temperatura. A natureza me-

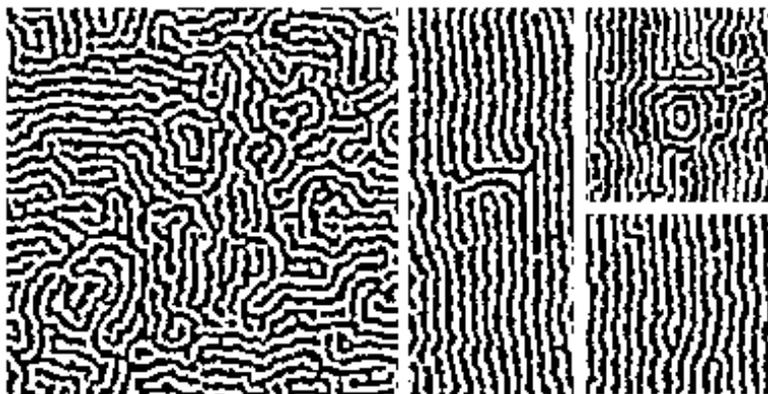


Figura 2.21: A configuração à esquerda mostra a fase isotrópica em  $T = 0.12$  para  $L = 192$ , apresentando perto do centro um defeito tipo alvo. Pequenos defeitos tipo alvo são comuns nessa fase. Acima e a direita, um grande defeito tipo alvo em uma porção destacada de uma configuração de  $L = 480$  em um processo fora de equilíbrio a  $T = 0.13$ . No meio, uma porção de uma configuração a  $T = 0.112$  exibindo um grande par de disclinações, formando uma discordância livre. Abaixo, pares de discordâncias em  $T = 0.104$ .

soscópica do modelo possibilitou observarmos excitações nas estruturas das faixas muito semelhantes as encontradas experimentalmente, algumas estão evidenciadas na Fig. 2.21. As simulações foram feitas para dois tamanhos lineares do sistema. As medidas para  $L = 192$  possibilitaram médias estatísticas mais seguras sobre todo o espectro de temperaturas, onde analisamos o comportamento para os parâmetros de ordem e suas respectivas susceptibilidades. A caracterização dos diferentes regimes de temperatura apontados por essas quantidades se tornou completa com as medidas das funções de correlação e fatores de estrutura para o caso  $L = 384$ , salientando a natureza das ordens subjacentes. Com base no conjunto de dados apresentados podemos afirmar a estabilidade de uma *fase esmética* em uma grande região de baixas temperaturas, seguida por uma *fase nemática* em uma faixa estreita de temperaturas antes de alcançar a *fase isotrópica* de altas temperaturas. A natureza das fases de baixa temperaturas determinadas pelas funções de correlação espaciais está resumida na tabela 2.1.

	fase esmética	fase nemática
correlações orientacionais	ordem de longo alcance	ordem de longo alcance
correlações translacionais	ordem de quasi-longo alcance	ordem de curto alcance

Tabela 2.1: Tipos de ordem subjacentes nas diferentes fases de baixa temperatura.

Embora as simulações tenham sido realizadas para apenas dois tamanhos e um número limitado de amostras, impossibilitando por exemplo uma análise de escalonamento em tamanhos finitos para determinação das classes de universalidade das transições esmética-nemática e nemática-isotrópica, conseguimos através das medidas dos parâmetros de or-

dem, das suas susceptibilidades e funções de correlação espaciais, e do fator de estrutura, aliadas a uma análise visual das configurações, estabelecer um cenário para a natureza das fases de baixa temperatura, do qual destacamos a estabilidade de uma fase nemática de ordem orientacional apenas.

# Conclusão

Nesta tese estudamos a fenomenologia dos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular através de análises teóricas e simulações numéricas. Os estudos se limitaram aos casos em que a anisotropia perpendicular é dominante e os momentos magnéticos apontam preferencialmente para fora do plano, isto é, abaixo da transição de reorientação dos spins. É nesse regime que surgem espontaneamente padrões bastante regulares de magnetização, sob campo externo nulo constituídos por padrões de faixas. Esse fenômeno pertence a uma vasta classe de sistemas físicos, químicos e biológicos, onde a formação de padrões espaciais é fruto de interações competindo em diferentes escalas de comprimento. Nos filmes magnéticos ultrafinos isso se deve à competição entre as interações de troca, de curto alcance e ferromagnética, e a dipolar, de longo alcance e antiferromagnética. Como fruto dessa competição resulta o estado fundamental de faixas desse sistema, onde o arranjo de suas paredes de domínio pode ser analisado como um tipo de sólido bidimensional com ordenamento anisotrópico.

Para estudar como se dão as quebras das simetrias características desses domínios de faixas, translacional anisotrópica e orientacional, introduzimos o modelo dipolar contínuo para filmes ultrafinos magnéticos com anisotropia perpendicular, um modelo *coarse grained* que captura a fenomenologia em escalas espaciais mesoscópicas. No primeiro capítulo discutimos diversas abordagens analíticas para esse problema. Fazendo uma aproximação quadrática para as interações no espaço de momentos, mostramos que a energia para o problema recai em uma classe geral de modelos denominada classe de Brazovskii. Nessa representação fica claro que o modelo dipolar contínuo possui espectro de flutuações com um mínimo em um vetor de onda diferente de zero, correspondendo aos estados de mínima energia, em que o papel das flutuações térmicas muda drasticamente o cenário de campo médio. A predição original de Brazovskii para a aproximação de campo médio autoconsistente nos modos de flutuação da amplitude da modulação prevê uma transição de primeira ordem induzida por flutuações para um estado modulado com ordens de longo alcance, porém esse não é o caso em duas dimensões. No contexto das análises via técnicas do grupo de renormalização e aproximações elásticas ao problema, mostramos que o problema recai nas transições de fase mediadas por defeitos, que descrevem por exemplo as transições encontradas no modelo XY e sólidos bidimensionais.

No segundo capítulo introduzimos a dinâmica utilizada para fazer as simulações de

Langevin do modelo dipolar contínuo, em busca de confirmar os cenários teóricos e experimentais apresentados no primeiro capítulo. Na literatura, esse tipo de simulações são geralmente feitos para estudos da dinâmica de crescimentos de domínios, com raras exceções para temperatura finita [82]. Nesta tese mostramos que as simulações da dinâmica de Langevin para modelos *coarse grained* se configuram como bons candidatos a estudar as propriedades de equilíbrio das fases moduladas, complementando os estudos de simulações de Monte Carlo de modelos mais microscópicos.

Um dos fenômenos observados nas simulações foi a dependência da largura das faixas com a temperatura, que é praticamente inacessível nas simulações de Monte Carlo dos modelos de Ising e Heisenberg com interações dipolares. Nesse caso observamos que a aproximação de campo médio descreve muito bem a dependência do vetor de onda característico da modulação, assim como a temperatura de Curie, quando a separação de fases se inicia a partir de um estado paramagnético. A dependência observada se ajusta bem em uma larga escala de temperaturas onde a fase de equilíbrio corresponde a fase isotrópica, indicando que embora a aproximação de campo médio descreva de maneira muito ineficiente a transição para uma fase com ordem orientacional, devido o efeito drástico das flutuações no anel de vetores de onda que minimizam a energia, a dependência na largura da faixa parece ser independente do grau de ordenamento das faixas. Essa observação está em acordo com as observações experimentais em filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular de Fe sobre Cu(100) feita por Portmann e colaboradores [43], onde a dependência quadrática é observada próxima à temperatura de Curie. Seria interessante observar nas simulações a influência recíproca entre a variação da largura das faixas e o grau de ordenamento das mesmas no regime de baixas temperaturas.

Por fim, analisamos as simulações de equilíbrio para uma região de parâmetros em que a largura das faixas é bastante estreita, com uma amplitude da modulação alta - um caso de estado fundamental profundo de faixas de largura de  $\sim 3$  sítios. A conjunção desses dois fatores levou a um efeito da fixação (*pinning*) da modulação na rede numérica. Esse efeito é relevante em todos regimes de temperatura, sobretudo para a estabilidade da fase esmética a temperaturas finitas. Como apontado no primeiro capítulo, essa propriedade está bem estabelecida na literatura, tanto do ponto de vista teórico [27, 52, 55], como experimental [12, 33]. A ordem translacional de quase longo alcance nessa fase indica que os defeitos topológicos, pares ligados de discordância, desempenham um papel fundamental, em acordo com a teoria KTHNY para transições de fase mediadas por defeitos. No entanto, a precisão de nossos resultados não permite ponderar sobre a natureza da transição esmético-nemática. Ainda assim, pela análise visual das configurações podemos distinguir os tipos de defeitos topológicos presentes nas duas fases e pudemos observar que a transição é marcada pela passagem a estruturas menos fixadas a rede numérica, em acordo com o cenário de "sólido flutuante" previsto analiticamente e observado experimentalmente. Para determinar com precisão a classe de universalidade da transição

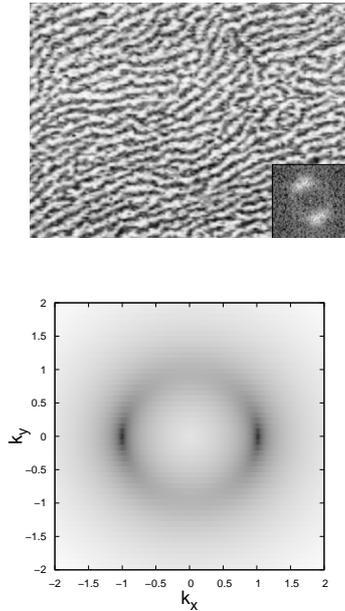


Figura 2.22: Comparação entre as flutuações angulares no fator de estrutura obtidas experimentalmente para filmes de Fe sobre Cu(100) - em detalhe na figura superior - e as obtidas através das simulações de Langevin do modelo dipolar contínuo (Fig. 2.16). Figura superior adaptada de [33].

esmética-nemática é necessário fazer uma análise de escalonamento para tamanhos finitos, através de simulações com mais amostragem estatística e para um número maior de tamanhos.

O principal resultado dessa tese se configura na observação e caracterização de uma fase nemática de baixas temperaturas. Suas propriedades estruturais são bem descritas pela análise teórica de Barci e Stariolo [10, 50] para um modelo geral de sistemas com interações competitivas em duas dimensões. Essa correspondência permite interpretar a fase nemática como uma condensação quadrupolar. A quebra de simetria orientacional da transição nemática-isotrópica é capturada pelas medidas do parâmetro de ordem orientacional e sua susceptibilidade. Esses dados sugerem que a transição é de segunda ordem, possivelmente pertencendo a classe não universal do modelo XY com anisotropia tetragonal ( $XYh_4$ ) [57], entretanto, uma análise de escalonamento para tamanhos finitos se faz necessária para corroborar essa análise. Esse resultado é reflexo de que a anisotropia imposta pela rede não é tão marcante quanto sugerido por Abanov e colaboradores [55], onde a transição é da classe de universalidade de Onsager-Ising e prevalecem as paredes entre domínios de faixas mutuamente perpendiculares, que não são observados nem experimentalmente, nem nas configurações apresentadas nas simulações. Entretanto, o papel da anisotropia tetragonal observada na fase nemática está em acordo com a análise de Abanov e colaboradores, no sentido em que estabiliza a ordem orientacional de longo

alcance. Outro ponto interessante é que a fase nemática parece ser fortemente suprimida pelo efeito da rede numérica, já que é observada apenas em uma faixa estreita de temperaturas antes da transição para a fase isotrópica. Isto é, nas simulações a fase dominante a baixas temperaturas é a esmética, enquanto se compararmos com um sistema isotrópico como considerado por Toner e Nelson [11], o cenário de temperaturas finitas é dominado pela fase nemática.

Evidências e caracterizações experimentais em filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular da fase nemática ainda não foram reportadas na literatura. Ainda assim, acreditamos que ela possa ser observada e quantificada através de uma análise de suas propriedades espaciais - como indicamos no primeiro capítulo, através da equação (1.50) é possível medir o parâmetro de ordem nemático através do fator de estrutura. Indicamos aqui a semelhança entre as flutuações angulares no fator de estrutura (ver Fig. 2.22) obtidos por Vaterlaus e colaboradores (2000) [33] para filmes de Fe sobre Cu(100), mostradas no primeiro capítulo, e os resultados apresentados nesta tese para o fator de estrutura na fase nemática.

# Referências Bibliográficas

- [1] C. Kooy and U. Enz. Experimental and theoretical study of the domain configuration in thin layers of  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ . *Philips Research Reports*, 15(1):7, Feb 1960.
- [2] A. Hubert and R. Schafer. *Magnetic Domains*. Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [3] R. Allenspach. Ultrathin films: magnetism on the microscopic scale. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 129:160, 1993.
- [4] M. Seul and D. Andelman. Domain shapes and patterns: the phenomenology of modulated phases. *Science*, 267:476–483, 1995.
- [5] C. B. Muratov. Theory of domain patterns in systems with long-range interactions of Coulomb type. *Phys. Rev. E*, 66(6):066108, Dec 2002.
- [6] S. A. Brazovskii. Phase transition of an isotropic system to a nonuniform state. *Sov. Phys. JETP*, 41:85–89, 1975.
- [7] N. D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, 17(22):1133–1136, Nov 1966.
- [8] J M Kosterlitz and D J Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(7):1181–1203, 1973.
- [9] J. A. Cuesta and D. Frenkel. Monte Carlo simulation of two-dimensional hard ellipses. *Phys. Rev. A*, 42:2126, 1990.
- [10] D. G. Barci and D. A. Stariolo. Competing interactions, the renormalization group, and the isotropic-nematic phase transition. *Phys. Rev. Lett.*, 98(20):200604, 2007.
- [11] J. Toner and D. R. Nelson. Smectic, cholesteric, and Rayleigh-Benard order in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 23:316, 1981.
- [12] O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia. An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films. *Nature*, 422:701–704, 2003.

- [13] L. Nicolao and D. A. Stariolo. Langevin simulations of a model for ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B*, 76(5):054453, 2007.
- [14] C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, and G. Lauhoff. Magnetism in ultrathin film structures. *Reports on Progress in Physics*, 71(5):056501 (78pp), 2008.
- [15] P. Molho, J. L. Porteseil, Y. Souche, J. Gouzerh, and J. C. S. Levy. Irreversible evolution in the topology of magnetic domains (invited). *Journal of Applied Physics*, 61(8):4188–4193, 1987.
- [16] M. Seul and R. Wolfe. Evolution of disorder in two-dimensional stripe patterns: "smectic" instabilities and disclination unbinding. *Phys. Rev. Lett.*, 68:2460, 1992.
- [17] K. De'Bell, A. B. MacIsaac, and J. P. Whitehead. Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, 72:225–257, 2000.
- [18] C. Won, Y.Z. Wu, J. Choi, W. Kim, A. Scholl, A. Doran, T. Owens, J. Wu, X.F. Jin, H.W. Zhao, and Z.Q. Qiu. Magnetic stripe melting at the spin reorientation transition in Fe/Ni/Cu(001). *Phys. Rev. B*, 71:224429, 2005.
- [19] J. G. Gay and R. Richter. Spin anisotropy of ferromagnetic films. *Phys. Rev. Lett.*, 56(25):2728–2731, Jun 1986.
- [20] R. Lorenz and J. Hafner. Magnetic structure and anisotropy of thin Fe films on Cu(001) substrates. *Phys. Rev. B*, 54(22):15937–15949, Dec 1996.
- [21] Y. Yafet and E. M. Gyorgy. Ferromagnetic strip domains in an atomic monolayer. *Phys. Rev. B*, 38(13):9145–9151, Nov 1988.
- [22] M. Carubelli, O. V. Billoni, S. A. Pighín, S. A. Cannas, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit. Spin reorientation transition and phase diagram of ultrathin ferromagnetic films. *Phys. Rev. B*, 77(13):134417, 2008.
- [23] D. Pescia and V. L. Pokrovsky. Perpendicular versus in-plane magnetization in a 2d Heisenberg monolayer at finite temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 65(20):2599–2601, Nov 1990.
- [24] P. Politi. Domain structures in ultrathin magnetic films. *Comments Cond. Matter Phys.*, 18:191–221, 1998.
- [25] D. P. Pappas, K. P. Kamper, and H. Hopster. Reversible transition between perpendicular and in-plane magnetization in ultrathin films. *Phys. Rev. Lett.*, 64:3179–3182, 1990.

- [26] R. Allenspach and A. Bischof. Magnetization direction switching in Fe/Cu(100) epitaxial films: Temperature and thickness dependence. *Phys. Rev. Lett.*, 69(23):3385–3388, Dec 1992.
- [27] R. Czech and J. Villain. Instability of two-dimensional Ising ferromagnets with dipole interactions. *J. Phys. : Condensed Matter*, 1:619–627, 1989.
- [28] B. Kaplan and G.A. Gehring. The domain structure in ultrathin magnetic films. *J. Magn. Magn. Mat.*, 128(1-2):111 – 116, 1993.
- [29] A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, M. C. Robinson, and K. De’Bell. Striped phases in two-dimensional dipolar ferromagnets. *Phys. Rev. B*, 51:16033, 1995.
- [30] A. Giuliani, J. L. Lebowitz, and E. H. Lieb. Ising models with long-range antiferromagnetic and short-range ferromagnetic interactions. *Phys. Rev. B*, 74(6):064420, 2006.
- [31] A. Vindigni, N. Saratz, O. Portmann, D. Pescia, and P. Politi. Stripe width and nonlocal domain walls in the two-dimensional dipolar frustrated ising ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 77(9):092414, 2008.
- [32] L. Landau and E. M. Lifshitz. *Statistical Physics*. Pergamon Press, 3rd edition, 1980. Volume 5 of Course of Theoretical Physics, Part I, pag. 432-445.
- [33] A. Vaterlaus, C. Stamm, U. Maier, M. G. Pini, P. Politi, and D. Pescia. Two-step disordering of perpendicularly magnetized ultrathin films. *Phys. Rev. Lett.*, 84:2247–2250, 2000.
- [34] K. J. Strandburg. Two-dimensional melting. *Rev. Mod. Phys*, 60(1):161–206, 1988.
- [35] J. W. Negele and H. Orland. *Quantum Many-Particle Systems*. Westview Press, 1998.
- [36] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 1995.
- [37] P. Politi and M. G. Pini. Dipolar interaction between two-dimensional magnetic particles. *Phys. Rev. B*, 66(21):214414, Dec 2002.
- [38] M. E. Fisher. Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics. *Rev. Mod. Phys.*, 70(2):653–681, Apr 1998.
- [39] T. Garel and S. Doniach. Phase transitions with spontaneous modulation-the dipolar Ising ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 26:325–329, 1982.

- [40] Sornette, D. . Undulation instability in stripe domain structures of « bubble » material. *Journal de Physique*, 48(1):151–163, 1987.
- [41] J. Villain. Essai de theorie statistique de la formation des antiphases periodiques. *J. Physique Radium*, 23:862–865, Oct 1962.
- [42] Y. Pomeau and P. Manneville. Stability and fluctuations of a spatially periodic convective flow. *J. Phys. (Paris)*, 40(23):L(609–612), Dec 1979.
- [43] O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia. Observation of stripe mobility in a dipolar frustrated ferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 96:047212, 2006.
- [44] P. C. Hohenberg and J. B. Swift. Metastability in fluctuation-driven first-order transitions: nucleation of lamellar phases. *Phys. Rev. E*, 52:1828–1844, 1995.
- [45] R. Jamei, S. Kivelson, and B. Spivak. Universal aspects of Coulomb-frustrated phase separation. *Phys. Rev. Lett.*, 94(5):056805, Feb 2005.
- [46] Axel Gelfert and Wolfgang Nolting. The absence of finite-temperature phase transitions in low-dimensional many-body models: a survey and new results. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(27):R505–R524, 2001.
- [47] J. Swift and P. C. Hohenberg. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability. *Phys. Rev. A*, 15(1):319–328, Jan 1977.
- [48] R. Shankar. Renormalization-group approach to interacting fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 66(1):129–192, Jan 1994.
- [49] Y. Shiwa. Exact renormalization group for the Brazovskii model of striped patterns. *J. Stat. Phys.*, 124(5):1207–1229, Sep. 2006.
- [50] D. G. Barci and D. A. Stariolo. Orientational order in two dimensions from competing interactions at different scales. *Phys. Rev. B*, 79(7):075437, 2009.
- [51] J. G. Dash. History of the search for continuous melting. *Rev. Mod. Phys.*, 71(5):1737–1743, Oct 1999.
- [52] S. Ostlund and B. I. Halperin. Dislocation-mediated melting of anisotropic layers. *Phys. Rev. B*, 23(1):335–358, Jan 1981.
- [53] David R. Nelson and B. I. Halperin. Dislocation-mediated melting in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 19(5):2457–2484, Mar 1979.
- [54] A. Kashuba and V. L. Pokrovsky. Stripe domain structures in a thin ferromagnetic film. *Phys. Rev. Lett.*, 70(20):3155–3158, May 1993.

- [55] Ar. Abanov, V. Kalatsky, V. L. Pokrovsky, and W. M. Saslow. Phase diagram of ultrathin ferromagnetic films with perpendicular anisotropy. *Phys. Rev. B*, 51:1023–1038, 1995.
- [56] J. V. José, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D. R. Nelson. Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model. *Phys. Rev. B*, 16(3):1217–1241, Aug 1977.
- [57] A. Taroni, S. T. Bramwell, and P. C. W. Holdsworth. Universal window for two-dimensional critical exponents. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(27):275233 (15pp), 2008.
- [58] W. T. Coffey, Y. P. Kalmykov, and J. T. Waldron. *Langevin Equation: With Applications in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. World Scientific, Singapore, 1996.
- [59] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, 49(3):435–479, Jul 1977.
- [60] M. C. Cross and P. C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, 65(3):851, Jul 1993.
- [61] J. L. García-Palacios and F. J. Lázaro. Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles. *Phys. Rev. B*, 58(22):14937–14958, Dec 1998.
- [62] W. F. Brown. Thermal fluctuations of a single-domain particle. *Phys. Rev.*, 130(5):1677–1686, Jun 1963.
- [63] E. A. Jagla. Hysteresis loops of magnetic thin films with perpendicular anisotropy. *Phys. Rev. B*, 72:094406, 2005.
- [64] C. Roland and R. Desai. Kinetics of quenched systems with long-range repulsive interactions. *Phys. Rev. B*, 42:6658, 1990.
- [65] D. Frenkel and B. Smith. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, New York, 1996.
- [66] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, 1992.
- [67] M. Frigo and S. G. Johnson. The design and implementation of fftw3. In *Proceedings of the IEEE*, volume 93, page 216, 2005.
- [68] I. Booth, A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, and K. De’Bell. Domain structures in ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. Lett.*, 75:950–953, 1995.

- [69] A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, K. De'Bell, and P. H. Poole. Phase diagram for a magnetic thin film with dipolar interactions and magnetic surface anisotropy. *Phys. Rev. Lett.*, 77:739, 1996.
- [70] S. A. Cannas, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit. Stripe-tetragonal first order phase transition in ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B*, 69:092409, 2004.
- [71] S. A. Cannas, M. Michelon, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit. Ising nematic phase in ultrathin magnetic films: a Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*, 73:184425, 2006.
- [72] L. C. Sampaio, M. P. de Albuquerque, and F. S. de Menezes. Magnetic relaxation and formation of magnetic domains in ultrathin films with perpendicular anisotropy. *Phys. Rev. B*, 54:6465, 1996.
- [73] J. H. Toloza, F. A. Tamarit, and S. A. Cannas. Aging in a two-dimensional Ising model with dipolar interactions. *Phys. Rev. B*, 58:R8885, 1998.
- [74] D. A. Stariolo and S. A. Cannas. Violation of the Fluctuation-Dissipation Theorem in a Two-Dimensional Ising Model with Dipolar Interactions. *Phys. Rev. B*, 60:3013, 1999.
- [75] S. A. Cannas, F. A. Tamarit, P. Gleiser, and D. A. Stariolo. Ultra-thin magnetic films and the structural glass transition: a modelling analogy. In C. Beck, G. Benedek, A. Rapisarda, and C. Tsallis, editors, *Complexity, metastability and nonextensivity*, pages 220–229. World Scientific, 2005.
- [76] R. Mulet and D. A. Stariolo. Langevin dynamics of fluctuation induced first order phase transitions: self consistent Hartree approximation. *Phys. Rev. B*, 75:064108, 2007.
- [77] G. A. Gehring and M. Keskin. The temperature dependence of the domain spacing in ultrathin magnetic films. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 5(44):L581–L585, 1993.
- [78] Z. Nussinov, J. Rudnick, S. A. Kivelson, and L. N. Chayes. Avoided critical behavior in  $O(n)$  systems. *Phys. Rev. Lett.*, 83(3):472–475, Jul 1999.
- [79] J. J. Christensen and A. J. Bray. Pattern dynamics of Rayleigh-Bénard convective rolls and weakly segregated diblock copolymers. *Phys. Rev. E*, 58:5364, 1998.
- [80] H. Qian and G. F. Mazenko. Defect structures in the growth kinetics of the Swift-Hohenberg model. *Phys. Rev. E*, 67:036102, 2003.
- [81] V. Privman. *Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems*. World Scientific, Singapore, 1990.

- [82] K. R. Elder, J. Viñals, and M. Grant. Ordering Dynamics in the Two-Dimensional Stochastic Swift-Hohenberg Equation. *Phys. Rev. Lett.*, 68:3024–3027, 1992.

# Apêndice A

## Cópia da publicação

## Langevin simulations of a model for ultrathin magnetic films

Lucas Nicolao\* and Daniel A. Stariolo†

*Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Caixa Postal 15051, 91501-979 Porto Alegre, Brazil*

(Received 1 December 2006; revised manuscript received 30 March 2007; published 31 August 2007)

We show results from simulations of the Langevin dynamics of a two-dimensional scalar model with competing interactions for ultrathin magnetic films. We find a phase transition from a high temperature disordered phase to a low temperature phase with both translational and orientational orders. Both kinds of order emerge at the same temperature, probably due to the isotropy of the model Hamiltonian. In the low temperature phase, orientational correlations show long-range order while translational ones show only quasi-long-range order in a wide temperature range. The orientational correlation length and the associated susceptibility seem to diverge with power laws at the transition. While at zero temperature the system exhibits stripe long-range order, as temperature grows, we observe the proliferation of different kinds of topological defects that ultimately drive the system to the disordered phase. The magnetic structures observed are similar to experimental results on ultrathin ferromagnetic films.

DOI: [10.1103/PhysRevB.76.054453](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.054453)

PACS number(s): 75.40.Mg, 75.40.Cx, 75.70.Kw

### I. INTRODUCTION

In the past years, the interest in understanding the thermodynamic and mechanical properties of magnetic ultrathin films has grown considerably. Part of this interest is obviously motivated by the great amount of technological applications related to their magnetic behavior, such as data storage and electronics.<sup>1</sup> In recent years, the advance in experimental techniques has made possible to study in great detail the complexity of magnetic order in thin films, where an extremely rich phenomenology is present.<sup>2-4</sup> Part of this phenomenology—as in many other physical and chemical systems<sup>5</sup>—is due to the presence of competing interactions acting on different length scales that frustrate the system and leads to mesoscopic pattern formation. In the case of an ultrathin magnetic film in the absence of an external magnetic field, stripe patterns of opposed magnetization are formed due to the competition between the ferromagnetic exchange interaction and the long-ranged dipolar interaction.<sup>6</sup>

Of particular interest for applications in data storage are films with strong perpendicular anisotropy, where spins point preferentially out of the plane. This happens when the (perpendicular) anisotropy energy overcomes the effect of dipolar interactions which induce an in-plane anisotropy. When this happens, the system goes through a “spin reorientation transition” (SRT).<sup>7-9</sup> In this phase, when magnetization points preferentially out of plane, complex magnetic structures arise, showing the formation of patterns with stripe order.<sup>2,3,10</sup> Antiferromagnetic stripe order dominates the low temperature, low energy behavior. As temperature increases toward the SRT, perfect stripe order is disrupted by proliferation of topological defects, such as dislocations and disclinations in the magnetic patterns, which eventually drive the system to the paramagnetic high temperature phase. Understanding how magnetic stripe order emerges from microscopic interactions and the characterization of the relevant thermodynamic behavior in the perpendicular phase is of relevance both from a fundamental point of view and for future applications in magnetic memory devices at the nanoscopic level.

Theoretical analysis of thermodynamic behavior relies on elastic Hamiltonian approximations and shows a variety of possible scenarios, strongly dependent on the behavior of different kinds of anisotropies present in the elastic energy.<sup>6,8,11</sup> In Ref. 11, two possible scenarios were anticipated, in one, there is a single phase transition from a high temperature paramagnetic phase to a smectic (stripe) phase at low temperatures. Other possible scenario shows the presence of an intermediate nematic phase, where translational order is lost but orientational one persists. Searching for evidence of these scenarios is one of our motivations for the present work. There is also a rather large number of numerical simulations and analysis of the different patterns observed in ultrathin film models. Relevant to the present work is a series of simulations by De’Bell *et al.*<sup>12</sup> They made detailed Monte Carlo simulations of Heisenberg and Ising systems with competing exchange and dipolar interactions. The stripe nature of the ground state in a two-dimensional system of Ising spins was determined analytically in Ref. 13. Phase diagrams showing the presence of the spin reorientation transition in Heisenberg models with perpendicular anisotropy, dipolar interactions, and with or without exchange interactions were also studied.<sup>9,14</sup> Cannas and co-workers have made a series of detailed predictions on phase diagrams and dynamic properties of a two-dimensional Ising model with competing exchange and dipolar interactions<sup>15-17</sup> by Monte Carlo simulations. In particular, in Ref. 17, evidence was presented of a new, intermediate, nematic phase between the stripe and disordered phases. There is also a rather large amount of numerical work focused on qualitative descriptions of patterns but few quantitative approaches.

Simulations of Heisenberg models have been largely restricted to determinations of phase diagrams mainly because analyzing quantitatively the structure of phases and patterns that emerge is a computationally very hard task in these models. On the other hand, studies of Ising models have also concentrated on quantitatively determining phase diagrams and also the presence and evolution of magnetic patterns. Nevertheless, in the Ising case, the sharp nature of domain walls induces a rather artificial structure of patterns, where, e.g., tetragonal symmetry dominates completely the scene in

square lattices. In this work, we introduce a model intended to make a bridge between the more realistic but cumbersome Heisenberg models and the much simpler Ising models which nevertheless are not suitable for understanding the diversity of magnetic structures present in a real ultrathin film. Our results are qualitative in the sense that we do not intend to reproduce experimental parameter values of a particular system, but nevertheless we present a quantitative picture of phase transitions and the behavior of relevant thermodynamic variables in the regime of perpendicular magnetization, which can be easily mapped to real situations. Furthermore, the model introduced below admits numerical as well as analytical treatment of both equilibrium and dynamical behaviors and a comprehensive picture is beginning to emerge.<sup>18,19</sup>

With this aim, in the present work, we introduce and analyze, by means of Langevin simulations, a coarse-grained model of an ultrathin film in two dimensions. By making reasonable approximations to the full micromagnetic dynamics, which should be satisfactory in the perpendicular region, we address the existence of antiferromagnetic stripe order, how thermal fluctuations affect this order, the possible appearance of a phase transition at finite temperature, and the characterization of the magnetic structures relevant in each temperature region. Coarse-grained models similar to the one introduced in the next section have been studied in the past. In an early work, Roland and Desai<sup>20</sup> studied the dynamical process of phase separation and emergence of stripe order in Langevin simulations of a model for ultrathin films. More recently, Jagla<sup>4</sup> explored the different morphologies and patterns that can appear in such systems, showing a variety of very interesting phenomena. Furthermore, he showed that the same model is capable of reproducing the detailed phenomenology of hysteretic behavior known in ultrathin films.<sup>21</sup> Nevertheless, to our knowledge, more quantitative studies of the phase transitions and the different kinds of magnetic order present in these types of models have not been addressed up to now.

## II. MODEL AND NUMERICAL IMPLEMENTATION

A widely acceptable microscopic description of micromagnetic dynamics is given by the Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) equation<sup>1</sup>

$$\frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} = -\alpha \vec{\phi} \times \vec{B} - \gamma \vec{\phi} \times (\vec{\phi} \times \vec{B}), \quad (1)$$

where  $\vec{\phi}$  is the three-dimensional magnetic moment vector,  $\vec{B}$  is the effective field acting on it, and  $\alpha$  and  $\gamma$  are microscopic phenomenological constants. The first term induces a precessional movement of the magnetic moment around the field, while the second term is a phenomenological one representing a damping effect which induces the magnetization to align with the field. This representation of magnetic dynamics is satisfactory in a wide variety of situations but it is very difficult to analyze analytically and is also very demanding computationally. Nevertheless, below the SRT where perpendicular anisotropy dominates, one can obtain a much simpler

description of magnetization dynamics suitable to our purposes. Considering a single moment  $\vec{\phi}$  with the effective field  $\vec{B}$  pointing in the  $z$  direction and expanding the three components of  $\vec{\phi}$  in Eq. (1), one easily finds that the evolution of the perpendicular component is given by<sup>21</sup>

$$\frac{\partial \phi_z}{\partial t} = \gamma B (1 - \phi_z^2), \quad (2)$$

where the constraint  $\phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2 = 1$  was used (this is automatically satisfied by the LLG dynamics). Then, in the limit of strong perpendicular anisotropy, when the effective field can be approximated to point preferentially along the  $z$  direction, the evolution of the perpendicular component is approximately autonomous, although the other two components are not. Consequently, from now on, we will restrict the analysis to the  $z$  component and drop out the corresponding subindex.

In the system of interest, the effective field will be composed typically of three contributions of the form

$$B = h + a\phi - b \int d^2 \mathbf{x}' J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \phi(\mathbf{x}'), \quad (3)$$

where  $h$  is an external field, the second term is a perpendicular anisotropy field, and the last term will be the dipolar field, in our case. The constants can be easily related to experimental ones, but this is not necessary for the purposes of this work, which is to study some universal properties of the phases and patterns emerging in such a system. The complete energy function of the model consists of both a local and a nonlocal term:

$$H[\phi] = H_L[\phi] + H_{NL}[\phi]. \quad (4)$$

According to Eq. (3) for the case of zero external field, the local potential can be written in full generality:

$$H_L[\phi] = \frac{1}{2} \int d^2 \mathbf{x} \left\{ \kappa [\nabla \phi(\mathbf{x})]^2 - r \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{u}{2} \phi^4(\mathbf{x}) \right\}. \quad (5)$$

In order that the local potential assumes the desired double-well structure,  $u$  and  $r$  are taken to be positive phenomenological constants. We have also added a continuous approximation for the exchange interaction in the form of an attractive square gradient term, which favors spatial homogeneity of the order parameter.

Disregarding higher order interactions in Eq. (3), the non-local term modeling a repulsive dipolar interaction has the form

$$H_{NL}[\phi] = \frac{1}{2\delta} \int d^2 \mathbf{x} \int d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}) J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \phi(\mathbf{x}'), \quad (6)$$

where  $J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) = 1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3$  in two dimensions. In Eqs. (5) and (6),  $\kappa$  and  $\delta$  are positive phenomenological constants that describe, respectively, the range of the short-range exchange interaction and the strength of the long-range dipolar one. In all space integrations it is assumed a short distance cutoff  $2\pi/\Lambda$ , which in the numerical implementation appears naturally as the lattice constant  $a$ .

Hence, in the limit of strong perpendicular anisotropy and strong damping, the relaxational dynamics of the system can be modeled by the following Langevin equations:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (7)$$

where  $\Gamma$  is a constant (the mobility) which sets the time scale, and  $\eta(\mathbf{x}, t)$  is a Gaussian thermal noise with  $\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$  and  $\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2\Gamma T \delta(t-t') \delta^2(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ , as usual. Equation (7) can be explicitly written as

$$\frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \kappa \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) + r \phi(\mathbf{x}, t) - u \phi^3(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\delta} \int d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}', t) J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) + \eta(\mathbf{x}, t) / \Gamma. \quad (8)$$

It is convenient to express the above equations in dimensionless form by means of a transformation of variables. Following Roland and Desai,<sup>20</sup> this transformation leads to the dimensionless form of Eq. (8):

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) + \phi(\mathbf{x}, t) - \phi^3(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\delta} \int d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}', t) J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (9)$$

with a short distance cutoff  $2\pi/\Lambda$  and thermal noise correlation  $\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2T \delta(t-t') \delta^2(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ . Now, the parameter  $\delta$  stands for the relative strength between the two competing interactions. The last Langevin equation can be written in Fourier space as

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -A(k) \phi(\mathbf{k}, t) + [-\phi^3(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t)]_{\mathbf{k}}^F. \quad (10)$$

To be compatible with the subsequent numerical implementation of this equation, the last two terms were not explicitly written in Fourier space. Here,  $[\ ]_{\mathbf{k}}^F$  means the  $\mathbf{k}$  component of the corresponding Fourier transform. The function  $A(k)$  corresponds to

$$A(k) = k^2 - 1 + J(k)/\delta, \quad (11)$$

which encodes all spatial information about the interactions. If this quantity has a negative minimum at a wave vector  $k_m$ , selected by varying  $\delta$ , the solution of Eq. (10) is a modulation in a single direction with periodicity given by  $k_m$ .

We have numerically solved the stochastic differential equation (10) discretizing space in a square lattice with mesh size  $a$ . Periodic boundary conditions were implemented using the Ewald summation technique<sup>22</sup> in the long-range dipolar interaction. After spatial discretization, this interaction is no longer isotropic for all spatial scales and it becomes gradually anisotropic as the wave vector comes close to  $\pi$ . At the relevant spatial scales for our simulations,  $J(\mathbf{k})$  is slightly anisotropic. It is important to note that symmetry properties of the different magnetic structures appearing at low temperatures are affected by the square symmetry of the lattice. In a triangular lattice, for example, the phenomenology may be to some extent different.<sup>23</sup> We found it advanta-

geous to use a spectral method, since in the Fourier space form of the Langevin equation (10), both spatial derivatives and the dipolar interactions acquire an algebraic form.

The time derivative was approximated using a simple Euler scheme with a time step  $\Delta t$ . Taking an isotropic form of the discretized Laplacian, the spatial derivatives were treated using a semi-implicit method, where the  $k^2$  term in Eq. (10) is evaluated in the new time value. This treatment is standard to improve the stability of the algorithm.<sup>24</sup> Therefore, discretizing Eq. (10) in such manner, i.e., through a first order semi-implicit spectral method, we obtain the following recurrence relation:

$$\phi(\mathbf{k}, t + \Delta t) = \frac{1}{1 + \Delta t k^2} \{ [1 + \Delta t - \Delta t a^2 J(\mathbf{k}) / \delta] \phi(\mathbf{k}, t) + [-\Delta t \phi^3(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t)]_{\mathbf{k}}^F \}. \quad (12)$$

After discretization, the noise term  $\eta$ , in the way it appears in the last equation, is a random Gaussian number with amplitude  $(2T\Delta t/a^2)^{1/2}$ . The dipolar interaction  $J(\mathbf{k})$  in Eq. (12) is the fast Fourier transform (FFT) of the result of the Ewald summation, evaluated at the beginning of the simulation. The computational advantage of updating the system in Fourier space is accomplished using an adaptive FFT algorithm,<sup>25</sup> where the main time consuming operations are transforming Fourier the field  $\phi$  and the  $(-\phi^3 + \eta)$  term and then transforming back the new field value.

### III. RESULTS

We performed simulations of the continuum dipolar model through Eq. (12). We analyzed the case  $\delta = 2\sqrt{5}$ , where the ground state is a stripe modulated state with wave vector  $k_m = 1.01447$ , which is close to  $\pi/3$ . Simulations were performed for system sizes  $L=192$  and  $L=384$  for different temperatures.

The existence of a nontrivial solution with wave vector  $k_m$  of the Langevin equation (10) at zero temperature depends on whether the term in Eq. (11) is negative at  $k=k_m$ . Before the variable transformation, this could be done varying the parameter  $r$ . After the transformation, the existence of a solution is achieved only by tuning the mesh size  $a$ . We set  $a = \sqrt{5}$ . The time integration was stable inside the range of temperatures of the simulations using a time step  $\Delta t = 0.5$ .

To measure the orientational order of the stripes, we first consider the director field:

$$\hat{n}(\mathbf{x}) = \frac{\nabla \phi(\mathbf{x})}{|\nabla \phi(\mathbf{x})|}, \quad (13)$$

which provides the local orientation of the stripe, when localized on a domain wall between opposite magnetizations. An analogy between this quantity and the Frank director of smectic liquid crystals has already been made on previous works,<sup>26-28</sup> and leads to the definition of a tensor order parameter:

$$Q_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = n_{\alpha}(\mathbf{x})n_{\beta}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}, \quad (14)$$

where  $\alpha, \beta = 1, 2$  are the Cartesian components. Similar to a nematic order parameter in a liquid crystal, an orientational order parameter  $Q$  can be defined as the positive eigenvalue of the spatial average of the above tensor order parameter.<sup>29</sup> This value corresponds to the quantity  $\cos 2\theta$ , where  $\hat{n} = (\cos \theta, \sin \theta)$  and  $\theta$  is the angle between the local director field and the mean orientation of the system. However, since the director field inside the stripe domains does not necessarily provide the local orientation of the stripe, to get a more precise value for the orientational order parameter, we average Eq. (14) only over domain wall sites, namely,

$$\bar{Q}_{\alpha\beta} = \frac{1}{L'} \sum'_{\mathbf{x}} Q_{\alpha\beta}(\mathbf{x}), \quad (15)$$

where the prime denotes the restricted sum with  $L'$  being the total number of domain wall sites. Now, we can write explicitly the orientational order parameter as

$$Q = \sqrt{\bar{Q}_{11}^2 + \bar{Q}_{12}^2}. \quad (16)$$

One possible way to characterize the translational order of the stripes is through a staggered magnetization defined as

$$m_{\mathbf{k}} = \left\langle \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{x}} \text{sgn}[\phi(\mathbf{x})] \text{sgn}[\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})] \right\rangle, \quad (17)$$

where  $\text{sgn}$  is the sign function and for  $\mathbf{k}$ , we use the ground state wave vector.

The results we present here were obtained with the following procedure: the system is initialized in the ground state and heated with a heating rate  $d_T$ . At each temperature of interest, the heating process is halted and the system is left to run a transient period of  $n_t$  time steps before we start recording system configurations at each  $n_m$  time step, used later to measure the desired quantities. Typical values of  $n_t$  were between  $5 \times 10^4$  and  $4 \times 10^6$  in order to get as close as possible to equilibrium. To estimate both transient ( $n_t$ ) and decorrelation ( $n_m$ ) times, we analyzed the behavior of the two-time correlation function for the different system sizes and temperatures. Typical  $n_m$  values were in the order of  $10^5$  and the results are averages over 20–60 system configurations.

In Fig. 1, we show the results for the translational and orientational order parameters. The data clearly show a phase transition, where both kinds of order emerge at a finite temperature. In the  $L=192$  case, we found that the two order parameters decay simultaneously to zero at  $T \approx 0.12$ , even though the staggered magnetization drops significantly at  $T = 0.11$ . In the region in between, the translational order parameter seems to present strong finite size effects. As the temperature is lowered in the ordered phase, a stripe structure develops gradually by the annihilation of defects (see Fig. 3). Although we were unable to study in more detail the finite size scaling near the transition, it seems improbable that an intermediate, nematiclike phase with only orientational order can be present in this model. Although transla-

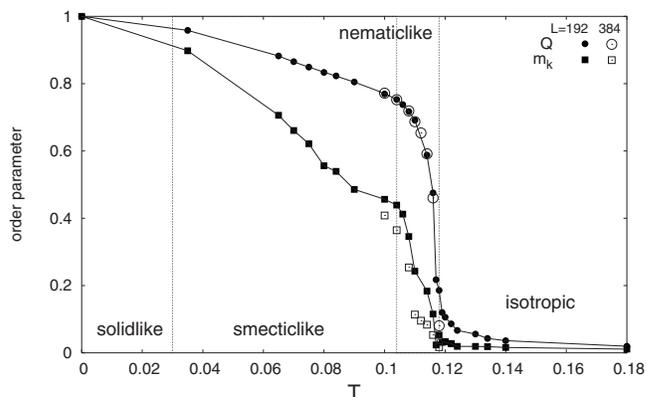


FIG. 1. Order parameters as a function of temperature for  $L = 192$ . The open symbols correspond to the larger system size,  $L = 384$ . Thin vertical lines separate approximately temperature ranges of the different regimes.

tional order decays faster than the orientational one, our results point to the presence of a single phase transition from a disordered high temperature phase to a low temperature phase with both orientational and translational orders. This is one of the possible scenarios that emerge from a theoretical analysis of a similar model by Abanov *et al.*<sup>11</sup>

To take a closer look at the structural properties of the different magnetic configurations, we calculated the static structure factor

$$S(\mathbf{k}) \equiv \langle |\phi(\mathbf{k})|^2 \rangle \quad (18)$$

and the associated spatial correlation function, given by

$$C(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}} S(\mathbf{k}), \quad (19)$$

that can be quickly computed using a fast Fourier transform.<sup>25</sup> The relevant directions for the spatial correlation function are the directions parallel and perpendicular to the stripes, respectively, denoted by  $C_x$  and  $C_y$ . These quantities describe the translational order along the two relevant directions. We have also computed nematic (or orientational) correlation functions,<sup>27,28</sup> since they encode information on the spatial decay of orientational order of the stripes. Nematic correlations are defined as

$$C_{nn}(\mathbf{r}) = \frac{2}{L^2} \sum_{\mathbf{x}} \langle \text{Tr} Q(\mathbf{x} + \mathbf{r}) Q(\mathbf{x}) \rangle \quad (20)$$

$$= \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{x}} \langle Q_{11}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) Q_{11}(\mathbf{x}) + Q_{12}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) Q_{12}(\mathbf{x}) \rangle, \quad (21)$$

where the function summed up in Eq. (20) is analogous to  $\langle \cos[2\theta(\mathbf{x} + \mathbf{r}) - 2\theta(\mathbf{x})] \rangle$ . Examples of translational and orientational correlation functions can be seen in Figs. 2 and 4 for two different temperatures.

For low enough temperatures ( $T < 0.11$ ), the nematic correlations are strongly affected by residual oscillations of the field  $\phi(\mathbf{x})$ . In order to obtain accurate values for the orientational correlation function, we found convenient to smooth

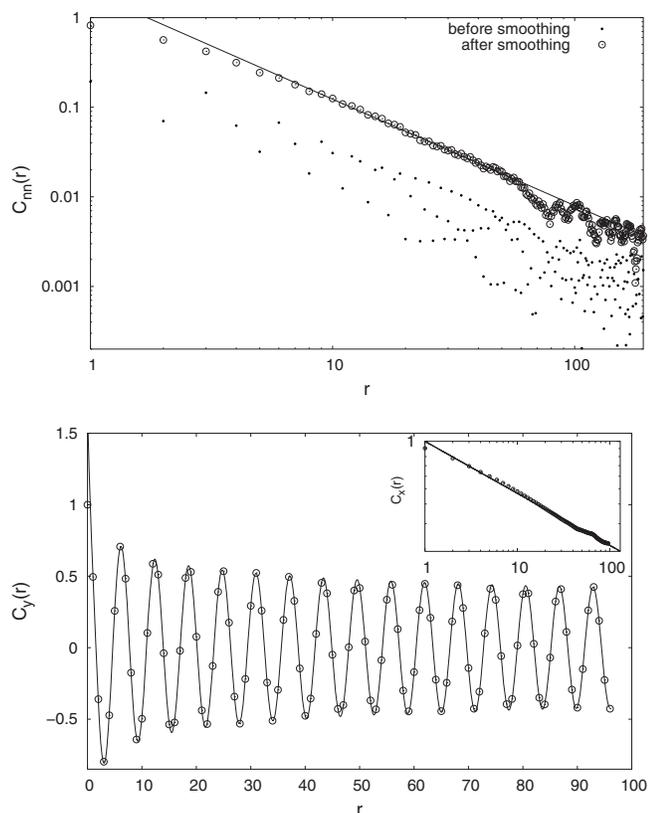


FIG. 2. Correlation functions in the smecticlike region at  $T=0.1$ . The upper figure shows the connected orientational correlation function in the perpendicular direction for  $L=384$ , plotted in log-log scale, before and after the smoothing procedure. The continuous line corresponds to a fitting by the function  $Ar^{-\alpha_y}$ , with  $\alpha_y=1.18$  and  $A$  a fitting parameter. In the parallel direction, this function decays immediately to zero. The lower figure shows the parallel (inset) and perpendicular spatial correlation functions, both for  $L=192$ . The parallel  $C_x$  function is plotted in a log-log scale. The continuous lines correspond to fittings by the functions  $r^{-\omega_x}$  and  $\cos(k_0r)r^{-\omega_y}$ , with  $\omega_x=0.33$  and  $\omega_y=0.19$  and  $k_0=1.014$ . Similar values were found in the  $L=384$  case.

the tensor order parameter (14) following a smoothing procedure introduced in Ref. 28. We smooth the fields  $Q_{11}(\mathbf{x})$  and  $Q_{12}(\mathbf{x})$  using for each the iterative process

$$f_{(n+1)}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}f_{(n)}(\mathbf{x}) + \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{x}' \in \text{NN}} f_{(n)}(\mathbf{x}'), \quad (22)$$

where  $f_{(n)}$  is one of the fields after  $n$  iterations, and NN means the four nearest neighbors of  $\mathbf{x}$  on the square lattice. We found that three iterations are enough to get sensible results see Fig. 2. Similar smoothing procedures for orientational correlation functions were used in simulations of melting of two-dimensional solid systems.<sup>30,31</sup> For clarity, in this work, we always show the connected orientational correlation function, where the mean square orientational order parameter is subtracted from Eq. (21). In this way,  $C_{nm}$  accounts for direction fluctuations only. At sufficiently low temperatures ( $T < 0.03$ ), spatial correlations decay immediately to a constant and there is translational and orientational long-

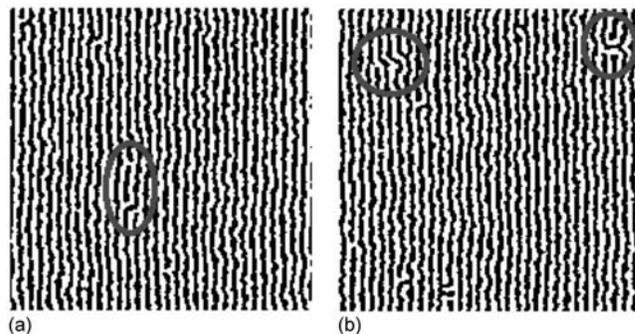


FIG. 3. Typical configurations in the smectic phase for  $L=192$  at (a)  $T=0.1$  and (b)  $T=0.104$ . In (a), the encircled region exhibits two pairs of dislocations; above, there is a “passage” due to two dislocations inserted in the same stripe, and below, a pair of dislocations separated by one stripe. In (b), a pair separated by four stripes and a pair formed by a larger Burgers vector dislocation and a double dislocation.

range order (see Fig. 1 for the values of the order parameters in the corresponding temperature regimes).

At slightly higher temperature and in a wide range ( $0.03 < T < 0.11$ ), we found evidence of a low temperature smecticlike regime, similar to the smectic crystal phase predicted by Abanov *et al.*<sup>11</sup> and observed experimentally by Portmann *et al.*<sup>2</sup> In this phase, undulation fluctuations (meandering excitations) alone are sufficient to cause algebraic decay of translational correlations at low temperatures for  $T > 0.03$ . However, at  $T=0.09$ , bound pairs of dislocations appear and become more common as temperature increases. Long-range orientational order persists over a wider range of temperatures, but above  $T=0.065$ , orientational order also starts to decay algebraically.

An example of the algebraic behavior of the correlation functions in this region is shown in Fig. 2 for  $T=0.1$ . It is important to note that the exponent of the translational algebraic decay in this regime increases with temperature and is different in the perpendicular and parallel directions—exponent values range from  $\omega_x=0.034$  and  $\omega_y=0.036$  for  $T=0.035$  to  $\omega_x=0.365$  and  $\omega_y=0.212$  for  $T=0.104$ . As for the orientational order, we observe a small temperature dependence of the algebraic decay exponent in the perpendicular direction, with exponents lying in the range  $1.18 < \alpha < 1.43$ . In the parallel direction, the orientational correlation function is a constant, indicating long-range order in this direction.

In Fig. 3, we illustrate some typical configurations of this phase. We see that it is characterized by undulation excitations and a finite density of dislocation pairs, some different types are shown encircled.

In a narrow range of temperatures,  $0.11 < T < 0.118$ , where the orientational order parameter is still high but the staggered magnetization drops considerably fast, we found a change of behavior in the correlation functions. In the parallel direction, translational order is decorrelated exponentially rapidly to zero, indicating the absence of translational order of the stripes. In the perpendicular direction, where order is more robust, there is an intermediate kind of behavior where the translational correlation function is better fitted by a product of a power law and an exponential. An example of

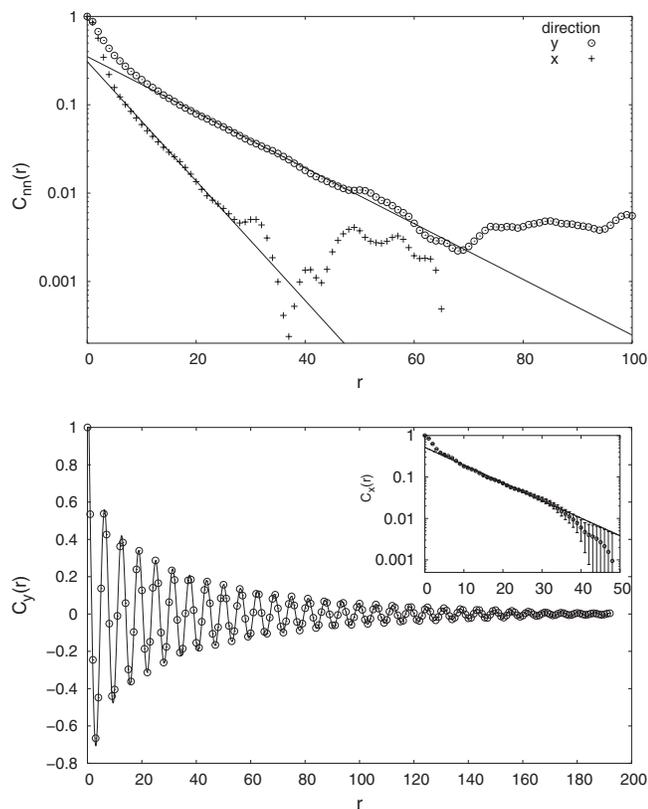
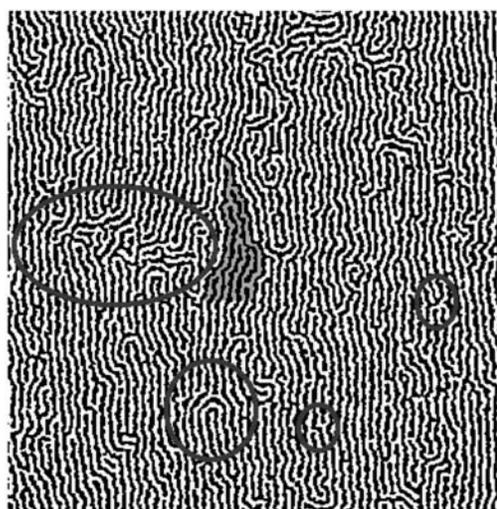


FIG. 4. Correlation functions in the nematiclike region at  $T = 0.114$  and  $L = 384$ . The upper figure shows the connected orientational correlation function in the perpendicular and parallel directions in a log-linear scale. The continuous lines correspond to fittings by the function  $A \exp(-r/\lambda)$ , with  $\lambda_y = 13.77$  and  $\lambda_x = 6.42$ . The lower figure shows the parallel (inset) and perpendicular spatial correlation functions. The parallel  $C_x$  function is plotted in a log-linear scale. The continuous lines correspond to fittings by the functions  $A \exp(-r/\xi_x)$  and  $\cos(k_0 r) \exp(-r/\xi_y) r^{-\omega_y}$ , with  $\xi_x = 10.17$  and  $\xi_y = 60.0$  and  $\omega_y = 0.26$  and  $k_0 = 0.98$ .

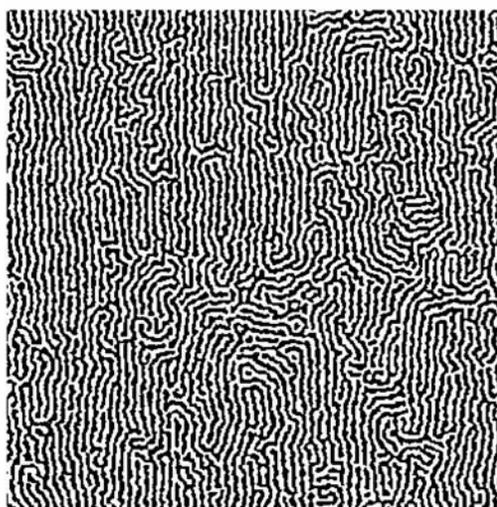
this behavior is shown in Fig. 4, where one can also see that the connected orientational correlation functions now decay exponentially in both directions but with different correlation lengths. Orientational domains in this regime are larger in the perpendicular direction.

Analyzing visually the configurations of this region, we observe many excitations disrupting orientational order. A typical configuration is shown in Fig. 5. We see that this regime presents large Burgers vector dislocations that can be regarded as a tightly bound pair of oppositely charged disclinations.<sup>26</sup> There are also what may be called a dislocation cascade, a series of bifurcations within a single stripe [colored in Fig. 5(a)]. Small domains of perpendicular orientation [encircled in Fig. 5(a)] are present as well and become more common and larger as temperature increases [see Fig. 5(b)]. Surrounded by topological defects, there are domains of locally smecticlike arranged stripes, where order is decorrelated mainly by meandering excitations and all kinds of pairs of dislocations [some are encircled in Fig. 5(a)].

In order to estimate the transition temperature  $T_c$  between the orientationally ordered and isotropic phases, we have measured the orientational correlation length and susceptibil-



(a)



(b)

FIG. 5. Typical configuration in the nematiclike region at (a)  $T = 0.114$  and (b)  $T = 0.116$  for  $L = 384$ . In (a), some defects are put in evidence. In small circles, two pairs of dislocations inside smecticlike domains; in the larger circle, a disclination dipole; shown colored a series of dislocations inside a single stripe and in an ellipse a domain of perpendicular orientation.

ity of  $Q$  in the isotropic phase. The results for  $L = 192$  are shown in Fig. 6, together with power-law fits. We found that  $T_c$  lies close to  $T_c \approx 0.117$  and that divergences are well fitted by power-law forms, at variance with the exponential divergence that one would expect in a defect-mediated transition according to the KTHNY theory.<sup>26,30</sup> The power-law behavior seems to be in agreement with a recent result in which the nematic transition is predicted to be second order.<sup>18</sup>

Finally, we discuss the evolution of the structure factor, Eq. (18), with temperature. In Fig. 7, we show four characteristic examples around the transition. From the first to the second plot, it can be seen that the sharp peaks characterizing stripe order are replaced by nematiclike peaks, spreaded along the ring  $|\mathbf{k}| = k_m$  due to angle fluctuations. The transition to the disordered phase seems to be through an increase of domains of perpendicular orientation of the stripes. In the

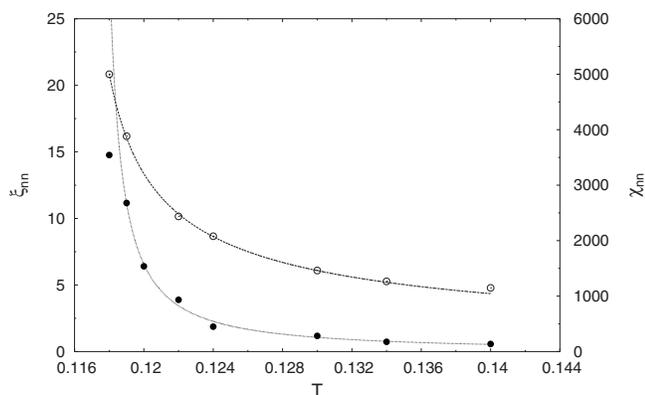


FIG. 6. Orientational correlation length (full symbols) and susceptibility (open symbols) as a function of temperature in the isotropic phase. The continuous curves show power-law fittings, namely,  $\xi_{nm}(T) \sim (T - 0.1172)^{-1.19}$  and  $\chi_{nm}(T) \sim (T - 0.1161)^{-0.61}$ .

structure factor, this is reflected as the growth of two symmetric peaks around  $k \approx k_m$  in the perpendicular direction. Immediately after the transition, at  $T=0.118$ , the four symmetrical peaks are equivalent, as can be seen in the third plot. As the temperature is further increased, angle fluctuations around these two preferential directions smear out the four peaks and the system becomes almost isotropic and the spectral weight of the structure factor lies on a ring with a weakly tetragonal shape, as shown in Fig. 7. A typical configuration illustrating the weakly tetragonal symmetry of the disordered phase just above the transition is shown in Fig. 8.

Not far away from the transition, the isotropic phase still presents the exponential-algebraic behavior of position correlations as in the nematiclike regime, indicating that it locally resembles the low temperature phase. The anisotropic feature of the orientational correlation function disappears in this phase, where  $C_{nm}$  decays exponentially to zero.

#### IV. CONCLUSIONS

We have made Langevin simulations at finite temperature of a model for ultrathin ferromagnetic films with perpendicular anisotropy. These systems have a stripe ground state due to competition between exchange and dipolar interactions. We have found a phase transition from a high temperature disordered phase to a low temperature phase with both translational and orientational orders. Below, the transition point isotropy is spontaneously broken, and a smecticlike magnetic structure develops. Both kinds of ordering seem to take place at the same  $T_c$ , in agreement with some previous theoretical predictions. The absence of an intermediate, purely orientational phase is probably due to the isotropic nature of the model Hamiltonian. Other terms, which explicitly break orientational order, may be necessary in order to have an intermediate nematic phase. This is what emerges from a recent analysis of the nematic transition in this same model, where an extra term was included and shown to be responsible for the existence of an intermediate nematic phase.<sup>18</sup> The nature of these terms depends on microscopic interactions, namely, on the modeling of the anisotropy contribution. In this re-

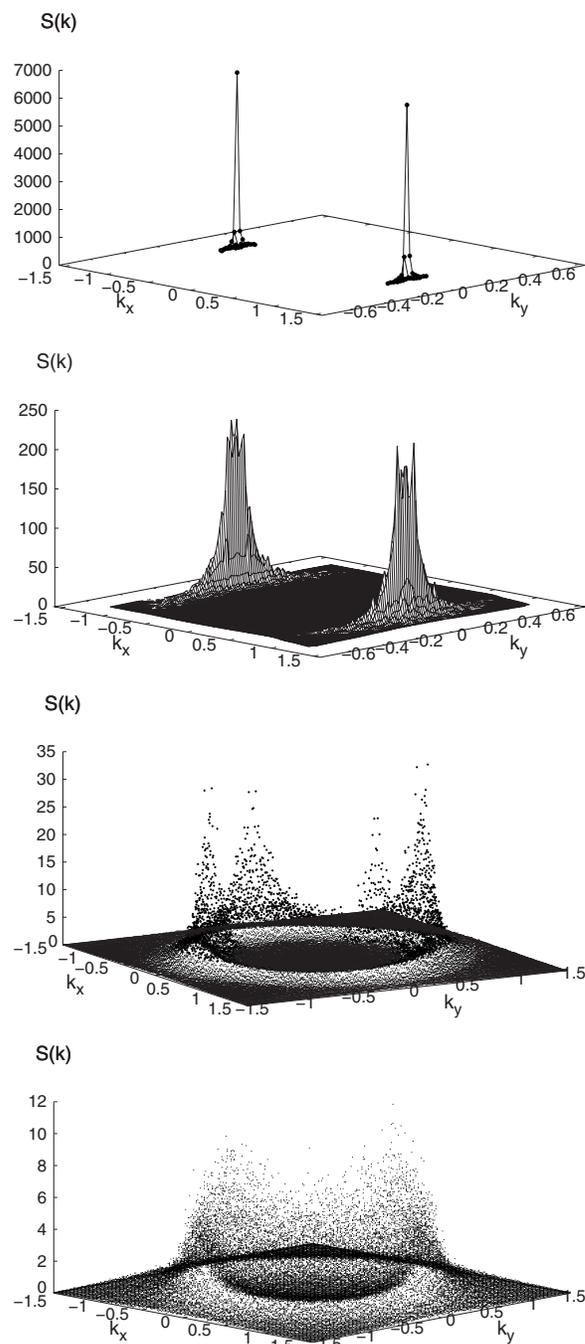


FIG. 7. Structure factor at  $T=0.1, 0.114, 0.118,$  and  $0.14$  for  $L=384$ .

spect, more input from experiments is fundamental.

We have found that the numerical results show complex magnetic structures, with translational and orientational correlations decaying algebraically at low temperatures. Translational correlations have different exponents for the longitudinal and perpendicular components, relative to the ground state stripe orientation. The exponents are also temperature dependent. In the case of orientational correlations, we observe a weak temperature dependence in the perpendicular direction and a saturation to a constant value in the longitudinal direction. Qualitatively, one can say that we observe

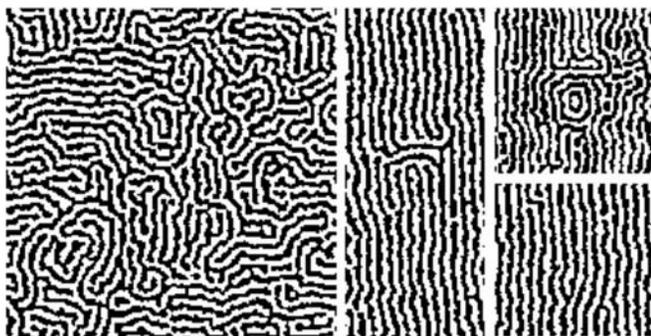


FIG. 8. The left configuration shows the isotropic phase at  $T=0.12$  for  $L=192$ , presenting a target defect close to its center. Small target defects are ubiquitous in this phase. At top right, we show a large target defect in a portion of a  $L=480$  configuration in an out-of-equilibrium disordering process at  $T=0.13$ . In the middle, a portion of a  $L=384$  configuration at  $T=0.112$  exhibiting a large dislocation pair made of disclination pairs. Below, pairs of dislocations at  $T=0.104$ .

translational quasi-long-range order and orientational long-range order at low temperatures.

As temperature grows, it is possible to observe a proliferation of topological defects, with structures similar to those observed in real systems. In a narrow region around the transition temperature, both translational and orientational correlations begin to decay exponentially. A power-law fit of the data of the orientational correlation length and the associated susceptibility in the high temperature region allows us to estimate the critical temperature. This power-law dependence of the orientational correlation length does not agree with the well known KTHNY theory of two-dimensional melting. We do not know to what extent the predictions from this theory should be applicable to magnetic two-dimensional systems like this. Our results are in agreement with a possible scenario for a smectic magnetic system put forward by Abanov *et al.* more than 10 years ago<sup>11</sup> and with a recent result on the second order nature of the nematic transition in the same model studied in this work supplemented by another term in

the Hamiltonian which explicitly breaks orientational order.<sup>18</sup>

We found that the weak anisotropy of the dipolar interaction due to spatial discretization and the short width of the stripes (of three grid points) has led to a pinning effect that favored the stripe orientation to be preferentially on the two Cartesian directions. However, looking at the structure factor around the transition, we found that the fluctuations responsible for disrupting orientational order are not restricted to the two Cartesian directions and the isotropic nature of the model still manifests.

More quantitative analytic predictions are clearly needed in order to assess the quality and limitations of our results. Also, it would be extremely interesting to do systematic experimental measurements of structure factors and correlations as a function of temperature, like the ones done by Pescia and co-workers.<sup>2,10,32</sup> This would allow, between other things, to elucidate the experimental conditions under which a nematic intermediate phase can be present in a magnetic system. The similarity between our simulations and experimental images of perpendicularly magnetized fcc Fe films grown on Cu(100) (Refs. 2, 10, and 32) is striking. For example, target defects first observed by Vaterlaus *et al.*<sup>10</sup> were observed in our simulations and are ubiquitous in the disordered phase (see Fig. 8). Finally, the dynamical behavior of these systems also deserves to be studied, because the presence of frustration and the emergence of many kinds of topological defects lead to a complex dynamics, with pinning of magnetic structures during long time scales, before the final, asymptotic equilibrium state sets in.<sup>19</sup>

#### ACKNOWLEDGMENTS

The Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq-Brazil is acknowledged for financial support. D.A.S. also wants to acknowledge the Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics for financial support to the Latinamerican Network on Slow Dynamics in Complex Systems through Grant No. NET-61.

\*nicolao@if.ufrgs.br

†Also at Abdus Salam International Center for Theoretical Physics, Trieste, Italy. stariolo@if.ufrgs.br

<sup>1</sup>A. Hubert and R. Schafer, *Magnetic Domains* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).

<sup>2</sup>O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia, *Nature (London)* **422**, 701 (2003).

<sup>3</sup>Y. Z. Wu, C. Won, A. Scholl, A. Doran, H. W. Zhao, X. F. Jin, and Z. Q. Qiu, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 117205 (2004).

<sup>4</sup>E. A. Jagla, *Phys. Rev. E* **70**, 046204 (2004).

<sup>5</sup>M. Seul and D. Andelman, *Science* **267**, 476 (1995).

<sup>6</sup>T. Garel and S. Doniach, *Phys. Rev. B* **26**, 325 (1982).

<sup>7</sup>R. Allenspach, M. Stampanoni, and A. Bischof, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3344 (1990).

<sup>8</sup>P. Politi, *Comments Condens. Matter Phys.* **18**, 191 (1998).

<sup>9</sup>A. B. MacIsaac, K. De'Bell, and J. P. Whitehead, *Phys. Rev. Lett.*

**80**, 616 (1998).

<sup>10</sup>A. Vaterlaus, C. Stamm, U. Maier, M. G. Pini, P. Politi, and D. Pescia, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2247 (2000).

<sup>11</sup>A. Abanov, V. Kalatsky, V. L. Pokrovsky, and W. M. Saslow, *Phys. Rev. B* **51**, 1023 (1995).

<sup>12</sup>K. De'Bell, A. B. MacIsaac, and J. P. Whitehead, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 225 (2000).

<sup>13</sup>A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, M. C. Robinson, and K. De'Bell, *Phys. Rev. B* **51**, 16033 (1995).

<sup>14</sup>A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, K. De'Bell, and P. H. Poole, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 739 (1996).

<sup>15</sup>P. M. Gleiser, F. A. Tamarit, and S. A. Cannas, *Physica D* **168-169**, 73 (2002).

<sup>16</sup>S. A. Cannas, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit, *Phys. Rev. B* **69**, 092409 (2004).

<sup>17</sup>S. A. Cannas, M. F. Michelon, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit,

Phys. Rev. B **73**, 184425 (2006).

<sup>18</sup>D. G. Barci and D. A. Stariolo, Phys. Rev. Lett. **98** 200604 (2007).

<sup>19</sup>R. Mulet and D. A. Stariolo, Phys. Rev. B **75**, 064108 (2007).

<sup>20</sup>C. Roland and R. C. Desai, Phys. Rev. B **42**, 6658 (1990).

<sup>21</sup>E. A. Jagla, Phys. Rev. B **72**, 094406 (2005).

<sup>22</sup>D. Frenkel and B. Smith, *Understanding Molecular Simulation* (Academic, New York, 1996).

<sup>23</sup>E. Y. Vedmedenko, A. Ghazali, and J. C. S. Lévy, Science **402**, 391 (1998).

<sup>24</sup>W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).

<sup>25</sup>M. Frigo and S. G. Johnson, Proc. IEEE **93** 216 (2005).

<sup>26</sup>J. Toner and D. R. Nelson, Phys. Rev. B **23**, 316 (1981).

<sup>27</sup>J. J. Christensen and A. J. Bray, Phys. Rev. E **58**, 5364 (1998).

<sup>28</sup>H. Qian and G. F. Mazenko, Phys. Rev. E **67**, 036102 (2003).

<sup>29</sup>J. A. Cuesta and D. Frenkel, Phys. Rev. A **42**, 2126 (1990).

<sup>30</sup>S. Z. Lin, B. Zheng, and S. Trimper, Phys. Rev. E **73**, 066106 (2006).

<sup>31</sup>A. Jaster, Phys. Rev. E **59**, 2594 (1999).

<sup>32</sup>O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia, Phys. Rev. Lett. **96**, 047212 (2006).