

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Fases Moduladas em Filmes Ferromagnéticos Dipolares*

Lucas Nicolao

Dissertação realizada sob orientação do Dr. Daniel Adrián Stariolo e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre

Julho - 2005

*Trabalho financiado pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Agradecimentos

★ A meu orientador, Daniel Stariolo, por ter confiado a mim um desafio em um instigante tema de pesquisa. Agradeço o companheirismo, a parceria e pelo ótimo exemplo que me oferece, profissional e pessoalmente.

★ Aos meus pais: Adriana e Geraldo Nicolao, por todo amor, e aos meus irmãos, Leonardo e Maurício, pela amizade e por iluminarem o caminho.

★ Aos meus amigos para toda vida, companheiros e tudo mais: Wilson Simeoni, Cristian Bonatto e Fernando Metz, esse que insistiu que eu seguisse sempre em frente. Obrigado por estimularem nosso convívio com a curiosidade e a paixão pelo trabalho científico.

★ Ao meu grande amigo Vinicius Zanchin de Campos, que também é de sempre: pela parceria e boa convivência no apartamento, especialmente aturando meu temperamento durante o período de escrita.

★ A Maria José Dornelles, a quem dedico esta dissertação, por todo carinho e pelo apoio sempre presente.

Resumo

Um modelo do tipo Ginzburg-Landau com interações competitivas entre um termo ferromagnético de curto alcance, e outro antiferromagnético de longo alcance (dipolar), é estudado no âmbito de reproduzir a rica fenomenologia de fases moduladas em filmes finos ferromagnéticos. Esse tipo de material pode apresentar ordens intermediárias as de um sólido e um líquido, e suas transições de fase dependem fortemente dos tipos de excitações geométricas que ele suporta. Dentre os estudos teóricos e numéricos, as simulações apresentadas aqui introduzem esse modelo dipolar contínuo como um bom candidato para estudar as fases complexas desse sistema, se mostrando em acordo com resultados experimentais.

Abstract

A Ginzburg-Landau model with competitive short-range ferromagnetic interactions and long-range (dipolar) antiferromagnetic interactions is studied on the scope to reproduce the rich phenomenology of modulated phases in ferromagnetic thin films. This kind of material can present intermediate order between a solid and a liquid, and its phase transitions depend strongly on the kinds of geometrical excitations that it supports. Amongst the theoretical and numerical studies, the simulations presented here introduce this continuous dipolar model as a good candidate to study the complex phases of this system, showing good agreement with experimental results.

Sumário

Resumo	i
Abstract	ii
1 Introdução	1
2 Filmes Finos Magnéticos	6
2.1 Modelos e Transições de Fase	8
2.2 Resultados Experimentais	12
2.3 O Modelo Dipolar Contínuo	15
3 Dinâmica de Langevin	20
3.1 Estabilidade Linear a Temperatura Zero	23
3.2 Integração Numérica	26
3.2.1 Parâmetros Adimensionais	26
3.2.2 Discretização Espacial	27
3.2.3 Método de Integração Temporal	30
4 Simulações	32
4.1 Parâmetro de Ordem Nemático	33
4.2 Parâmetro de Ordem Translacional	34
4.3 Resultados	36
5 Conclusões	55
Referências	58

Capítulo 1

Introdução

Em diversos sistemas magnéticos, de diferentes composições e formatos, surgem espontaneamente fases de equilíbrio que correspondem a estados de magnetização não homogênea no espaço, formando padrões complexos de magnetização que dependem do sistema específico. Filmes finos magnéticos, que têm importantes aplicações no desenvolvimento de dispositivos e memórias magnéticas, podem apresentar fases com padrões espaciais simples. O objetivo desse trabalho é estudar as propriedades termodinâmicas dessas fases complexas presentes em filmes finos magnéticos (quase) bidimensionais.

Semelhantemente aos sistemas magnéticos, uma grande variedade de sistemas físico-químicos exibem texturas e padrões espaciais. Em geral predominam morfologias simples com algum grau de regularidade, como faixas e bolhas em sistemas bidimensionais, e camadas, tubos e estruturas esféricas em sistemas tridimensionais [1].

A figura (fig. 1.1) ilustra como a predominância de um pequeno conjunto de características morfológicas conduzem a padrões semelhantes, independentemente dos detalhes microscópicos. Os sistemas vão desde supercondutores do tipo I no seu estado intermediário de equilíbrio (1.1.A) a misturas químicas exibindo padrões complexos de reação-difusão em um estado estacionário fora do equilíbrio (1.1.C). Ainda, o comprimento característico ou período dos padrões varia desde escalas da ordem de angstroms, como na fase encrespada de fosfolipídios (1.1.B), até centímetros, como nos padrões convectivos gerados por uma instabilidade de Rayleigh-Bénard (1.1.D).

Dentre esses sistemas existe uma grande parte que, assim como em (1.1.A e B), exhibe espontaneamente padrões de domínios em *equilíbrio*. 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.

Filmes finos magnéticos são exemplos comuns desses sistemas e exibem essencialmente padrões de faixas e bolhas, como pode ser visualizado na figura (fig. 1.2). Outros exemplos

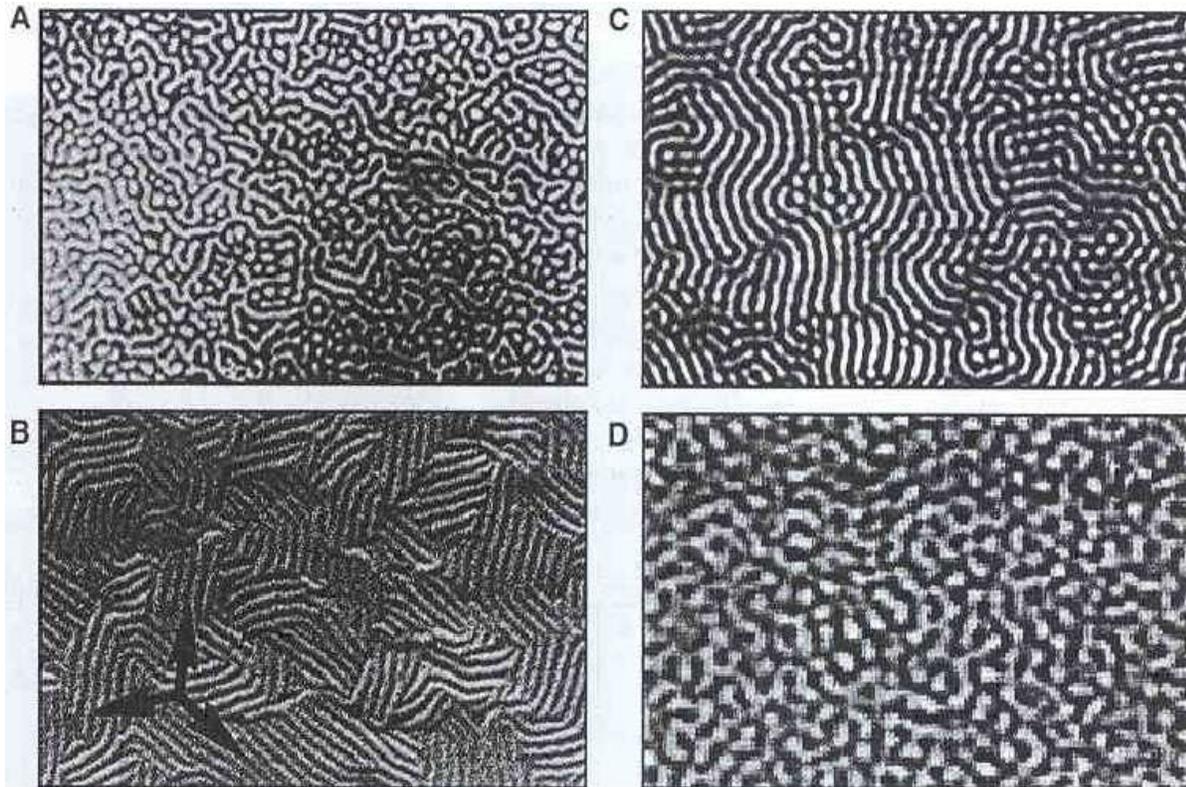


Figura 1.1: domínios de faixas em sistemas físicos e químicos em escalas distintas. (A) Regiões normais e supercondutoras alternadas na superfície de um supercondutor do tipo I, em seu estado intermediário; período $\sim 7\mu\text{m}$. (B) Fase "encrespada" em uma vesícula composta por fosfolipídios; período $\sim 240\text{\AA}$. (C) Padrões de Turing estacionários em um sistema químico de reação-difusão; período $\sim 0.25\text{mm}$. (D) Fotografia de flutuações precedendo a aparição de padrões de rolos convectivos em um gás CO_2 sob uma instabilidade de Rayleigh-Bénard; período $\sim 1\text{cm}$. (adaptado de [1])

em duas e três dimensões estão ilustrados nas figuras (fig. 1.2,1.3).

Como a fenomenologia, nas propriedades estruturais de equilíbrio e nos modos de evolução, é muito parecida em sistemas com diferentes características microscópicas, sugere-se um mecanismo comum para a ocorrência das fases moduladas.

Esse mecanismo é a presença de interações competitivas que frustram o sistema; a modulação resulta do compromisso do sistema em tentar satisfazer ambas interações (que geralmente atuam em diferentes escalas de comprimento). Seu período é determinado pela força relativa das interações que minimiza a energia e pode ser ajustado variando parâmetros como temperatura e campos externos.

Um outro mecanismo possível é o acoplamento entre diferentes parâmetros de ordem, em um sistema descrito por dois ou mais, que individualmente favorecem diferentes estados de equilíbrio.

No caso presente, as fases moduladas em filmes magnéticos surgem como fruto da

competição entre duas interações comuns em sistemas magnéticos: uma interação ferromagnética de curto alcance que favorece um estado fundamental de magnetização homogênea e uma interação dipolar de longo alcance que favorece um estado de magnetização antiferromagnética.

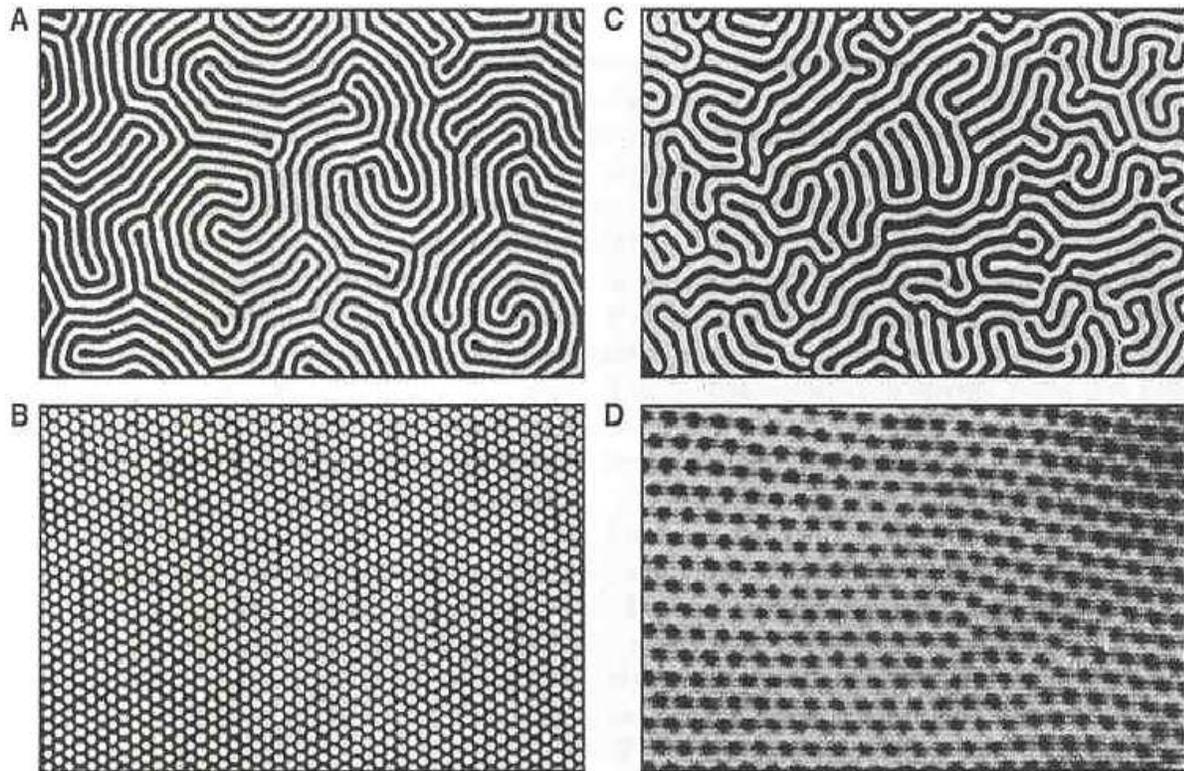


Figura 1.2: Domínios em fluidos e sólidos magnéticos. Fase de faixas (A) e bolhas (B) alternando magnetização positiva (em branco) e negativa (em preto) em um filme magnético de granada (*magnetic garnet film*) com $13\mu\text{m}$ de espessura crescido na face $\langle 111 \rangle$ da granada de gadolínio e gálio (GGG); período $\sim 10\mu\text{m}$. (C e D) Ferrofluido confinado entre duas placas de vidro, sujeito a um campo magnético perpendicular à camada de fluido exibindo fases labirínticas (C) e de bolhas (D); período $\sim 4\mu\text{m}$. (adaptado de [1])

Muitas vezes as fases moduladas, como a de faixas, apresentam ordens intermediárias entre as de um líquido, que possui a maior simetria possível, e de um sólido, que pode ter a menor simetria possível consistente com um preenchimento regular do espaço. Dos materiais que apresentam tais ordens intermediárias, os mais conhecidos e estudados são os *cristais líquidos*. São sistemas constituídos de moléculas orgânicas altamente anisotrópicas, como por exemplo em forma de barras ou elipsóides, onde geralmente a ordem emerge basicamente como resultado da forma da molécula e do volume excluído (uma repulsão anisotrópica do tipo carço rígido) [2].

Dentre a rica diversidade de cristais líquidos, o especial interesse é no cristal líquido esmétrico bidimensional, onde as moléculas se organizam em camadas a baixas temperatu-

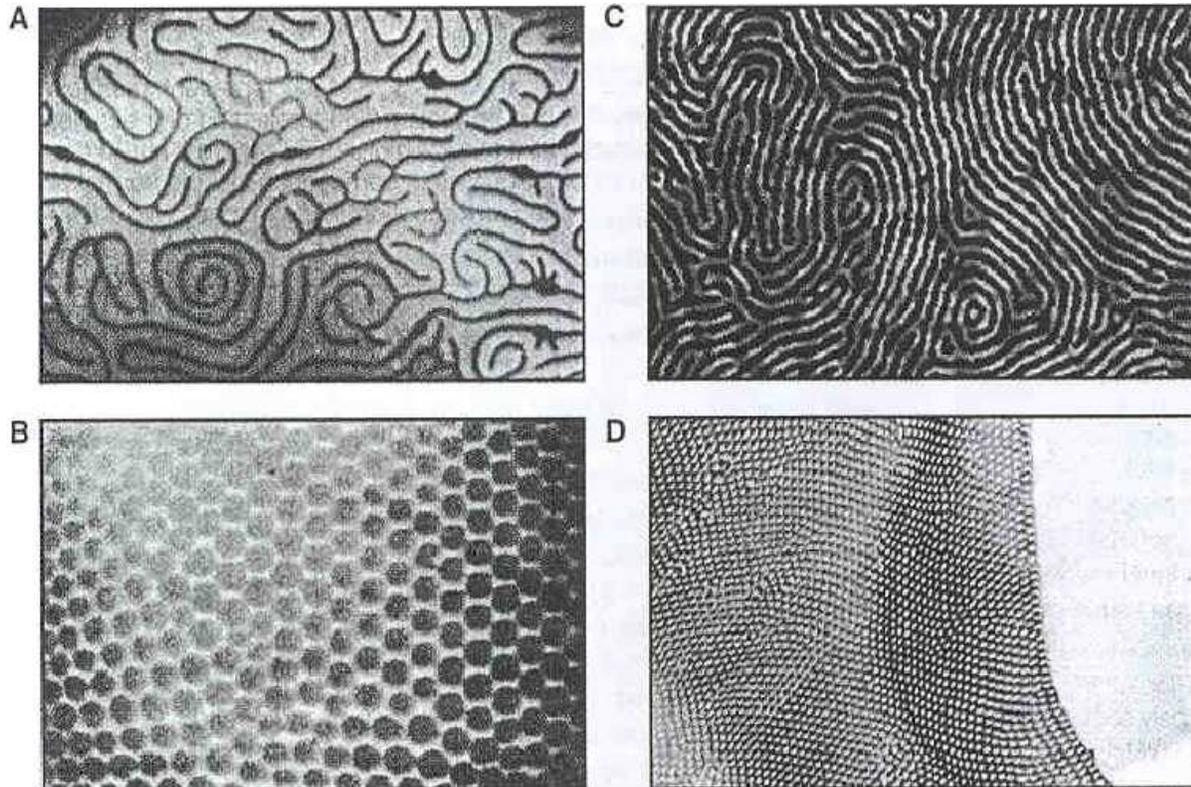


Figura 1.3: Fase de faixas e de bolhas em sistemas orgânicos 2D e 3D. (A e B) Filme orgânico monomolecular (filme de Langmuir) confinado em uma interface ar-água exibindo fase de faixas (período $\sim 1.5\mu\text{m}$) e fase de bolhas (período $\sim 20\mu\text{m}$). (C e D) Filme de polímeros (diblock copolymers) exibindo fase de faixas (período $\sim 400\text{\AA}$) e fase de bolhas (período $\sim 160\text{\AA}$). (adaptado de [1])

ras, alinhadas em uma direção preferencial; essa é a *fase esmética*, correspondente a uma ordem cristalina e, como será ressaltado no próximo capítulo, possui a mesma simetria de uma fase modulada de *faixas*. A temperaturas maiores, na *fase nemática* com ordem intermediária, as camadas perdem definição mas permanecem orientadas em torno de uma direção preferencial. Na *fase isotrópica* de altas temperaturas o cristal líquido não tem nenhuma ordem, correspondendo a uma fase líquida. Essas diferentes fases estão bem ilustradas na figura (fig. 1.4).

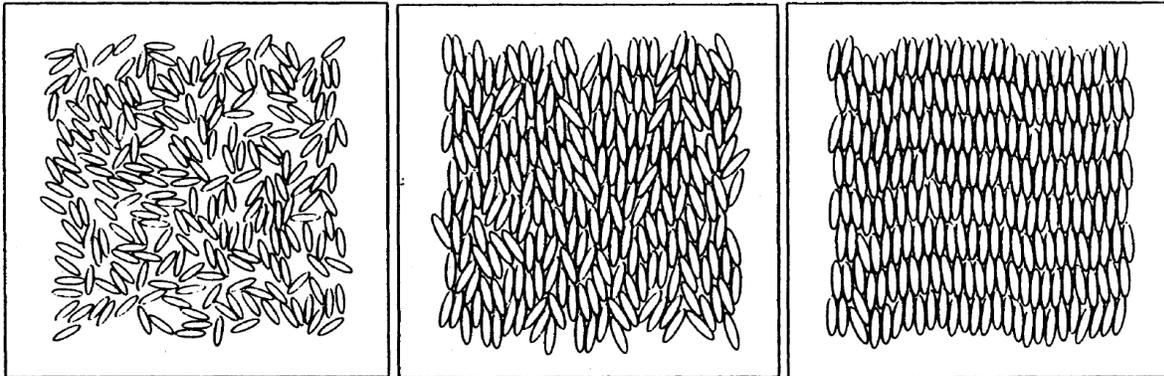


Figura 1.4: As fases isotrópica, nemática (ordem orientacional) e esmética (ordens orientacional e translacional) em uma simulação de Monte Carlo de elipses rígidas bidimensionais. (adaptado de [3])

Esse trabalho trata de estudar a presença e os aspectos dessas diferentes fases termodinâmicas em filmes finos magnéticos apresentando faixas de magnetização alternada, como na figura (fig. 1.2 A). Diferente do sistema visualizado nesta figura, os filmes finos magnéticos de interesse são de metais depositados sobre substratos de metais e que tem uma espessura da ordem de algumas monocamadas, como será especificado no próximo capítulo.

No próximo capítulo (capítulo 2) serão colocados alguns pontos importantes quanto a fenomenologia de filmes magnéticos e sob que condições estes podem apresentar fases moduladas. Depois serão revisados alguns trabalhos relevantes no sentido de entender as diferentes fases termodinâmicas correspondentes aos estados de faixas e apresentar avanços no estudo do filme magnético de interesse. Depois de terem sido discutidos os diferentes modelos para esse sistema, contrapostos a evidências experimentais, o modelo de caráter fenomenológico utilizado nesse trabalho é introduzido ao final do capítulo 2.

O estudo das propriedades termodinâmicas do modelo é feito através de *simulações numéricas* da dinâmica proposta para modelar a relaxação do sistema quando em contato com um banho térmico. Essa dinâmica é a *dinâmica de Langevin*, apresentada no capítulo 3. Tratando-se de um estudo computacional, nesse capítulo também são apresentadas as técnicas utilizadas para a simulação. A apresentação e discussão dos resultados das simulações são feitos no capítulo 4, seguido pelas conclusões.

Capítulo 2

Filmes Finos Magnéticos

Geralmente, um ferromagneto tridimensional abaixo da temperatura de Curie não apresenta magnetização global porque é formado de regiões contíguas onde a magnetização está orientada em diferentes direções. Essas regiões (com tamanho típico de 1 a $10\mu\text{m}$) são chamadas de domínios magnéticos e estão separadas por paredes de domínios (com tamanho típico de 0.01 a $0.1\mu\text{m}$) onde a magnetização rota continuamente de uma direção a outra [4].

A magnetização dentro de cada domínio é devido ao acoplamento ferromagnético de troca (\mathcal{H}_{ex}) que tende a alinhar momentos magnéticos vizinhos. A existência dos domínios é devida a energia dipolar (\mathcal{H}_{dip}), por isso também chamada energia "desmagnetizante" (ou "magnetostática" por ser a rigor a verdadeira interação magnética entre spins, ou também "de anisotropia da forma" por sua minimização depender fortemente da forma da amostra). Finalmente, domínios são magnetizados em direções preferenciais ditadas pela energia de anisotropia magnetocristalina (\mathcal{H}_{an}), que depende dos eixos cristalinos.

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

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_{dip} + \mathcal{H}_{an} \quad (2.1)$$

Dentre alguns materiais quase bidimensionais que formam estruturas de domínios similares às de interesse e que são descritos por esse tipo de hamiltoniano, os mais comuns são filmes magnéticos de granada [5] e camadas de terras-raras em estruturas de perovskita $\text{REBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (onde RE representa um terra-rara da família dos lantanídeos) [6].

No entanto, o interesse é em filmes (ultra) finos como o caso de filmes de metais sobre substratos de metais, como Fe sobre Cu e Co sobre Au [6], com espessuras variando de 1 a 10 monocamadas.

Sendo assim, a anisotropia é uniaxial e uma forma genérica para o hamiltoniano (2.1) em duas dimensões (uma monocamada) é feita tomando os momentos magnéticos como

spins de Heisenberg de módulo unitário. Então, o primeiro termo

$$\mathcal{H}_{ex} = \frac{J}{2} \int d\vec{x} (\nabla \vec{S})^2 \quad (2.2)$$

é a interação de troca de Heisenberg na aproximação contínua. O segundo termo

$$\mathcal{H}_{dip} = \mathcal{H}_{dip}^{(1)} + \mathcal{H}_{dip}^{(2)} \quad (2.3)$$

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

$$\mathcal{H}_{dip}^{(1)} = \frac{\Omega}{8\pi} \int \frac{d\vec{x}d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} \vec{S}(\vec{x}) \cdot \vec{S}(\vec{x}') \quad (2.4)$$

e na parte anisotrópica

$$\mathcal{H}_{dip}^{(2)} = -\frac{3\Omega}{8\pi} \int \frac{d\vec{x}d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} (\vec{S}(\vec{x}) \cdot \vec{\nu})(\vec{S}(\vec{x}') \cdot \vec{\nu}) \quad (2.5)$$

onde $\vec{\nu} \equiv (\vec{x} - \vec{x}')/|\vec{x} - \vec{x}'|$ e $\Omega > 0$ é uma constante que mede a intensidade da energia dipolar.

O termo $\mathcal{H}_{dip}^{(1)}$ representa o acoplamento antiferromagnético de longo alcance, enquanto que $\mathcal{H}_{dip}^{(2)}$ representa a anisotropia do termo cristalino, que favorece orientações paralelas ao plano (estados \parallel). O terceiro termo

$$\mathcal{H}_{an} = -\frac{K}{2} \int d\vec{x} S_z^2(\vec{x}) \quad (2.6)$$

é uma anisotropia de uma monocamada causada pelo campo cristalino. A constante K é considerada positiva para favorecer a formação de domínios com magnetização para fora do plano (estados \perp).

Transição de fase de reorientação

Além da competição entre a interação dipolar $\mathcal{H}_{dip}^{(1)}$ e a interação ferromagnética que favorece a formação de domínios para qualquer valor da constante dipolar [4], existe também a competição entre a anisotropia magnetocristalina e a anisotropia da interação dipolar $\mathcal{H}_{dip}^{(2)}$, o que pode levar a chamada "transição de fase de reorientação" (TFR) dos spins de um estado \perp de baixas temperaturas a um estado \parallel .

Por ser de natureza anisotrópica, a TFR depende fortemente da forma da amostra e em particular, da espessura do filme: a magnitude da interação dipolar cresce com o número

de camadas, enquanto a anisotropia cristalina permanece praticamente constante devido a seu caráter de superfície. Portanto a TFR ocorre quando a espessura é aumentada.

O mesmo fenômeno de reorientação pode ser observado aumentando a temperatura, quando os parâmetros (J, Ω, K) são enfraquecidos pelas flutuações térmicas. Neste caso, $K(T)$ pode ser menor do que $\Omega(T)$ e o estado \parallel ser o preferido - mesmo que a temperatura zero $K(0) > \Omega(0)$.

Os domínios magnéticos que estudados aqui são esperados a temperaturas (espessuras) *menores* que a da transição de reorientação. A natureza dessa transição é sensível à estrutura desses domínios [4] - que dependem por sua vez do estado fundamental e do efeito das flutuações térmicas sobre ele.

Estados fundamentais

Em uma monocamada e sem campo externo aplicado¹, o estado fundamental é o de faixas, isto é, o sinal da magnetização alterna em apenas uma direção com um vetor de onda característico $k_m \neq 0$.

Cálculos com variáveis de Ising [7], de Heisenberg [4] e outros baseados em aproximações contínuas [8] mostram que a fase de faixas é a mais estável acima de um valor crítico da constante de troca, abaixo do qual o estado fundamental é antiferromagnético. Também mostram que, embora a largura da faixa creça exponencialmente com a magnitude relativa das interações de troca e dipolar ($\delta \equiv 16\pi J/\Omega$), no limite termodinâmico o estado ferromagnético nunca é o estado fundamental.

No entanto, experimentalmente ou em estudos a tamanhos finitos, domínios podem ser maiores que o tamanho linear da amostra e o estado ferromagnético ser o mais estável.

2.1 Modelos e Transições de Fase

A competição entre as interações ferromagnéticas e dipolares a temperatura e campo zero leva o sistema a uma estrutura ordenada de domínios - o estado de faixas.

Essa rede de paredes de domínio (fig. 2.1) pode ser vista como um *sólido bidimensional* caracterizado por:

1. uma ordem orientacional - é invariante sob rotações de $\pm\pi$.

¹daqui em diante será o caso, a menos que apontado

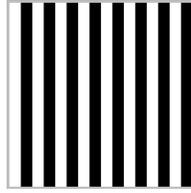


Figura 2.1: estrutura de faixas puras

2. uma ordem posicional - 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). Isso leva a chamar a ordem posicional de uma *ordem translacional anisotrópica* [11].

Fusão de faixas

Depois de Brazovskii (1975) [9], foi reconhecido que sistemas isotrópicos ou fracamente anisotrópicos onde o espectro de flutuações tem o mínimo em um vetor de onda diferente de zero podem sofrer uma transição de fase de primeira ordem induzida por flutuações, em contraste com a de segunda ordem prevista em campo médio. Em sua análise, a fase isotrópica ou paramagnética permanece metaestável na fase modulada até temperatura zero, caracterizando a transição de primeira ordem. Nessa abordagem de Brazovskii, que é discutida no contexto de filmes finos adiante na seção 2.3, as flutuações levando a transição são de natureza orientacional.

A possibilidade desses sistemas sofrerem duas transições para cristalizar, uma para cada quebra de simetria contínua, foi sugerida por Toner e Nelson (1981) [10] como uma extensão de teorias de transições de fase em duas dimensões mediadas por defeitos [11, 12] para sistemas de faixas (ou camadas) com ordem translacional anisotrópica, como filmes de cristais líquidos esméticos e colestéricos e padrões na convecção de Rayleigh-Bénard.

A natureza das transições de fase que levam o sistema do sólido de faixas puras ao líquido isotrópico depende essencialmente dos tipos de excitações induzidas por flutuações térmicas que esse sólido suporta e as condições sob as quais elas ocorrem.

Sendo assim, Toner e Nelson consideraram as seguintes possibilidades:

1. as flutuações do tipo fônon, como distorções sinuosas nas paredes das faixas (fig. 2.2.a) ou compressões das mesmas (fig. 2.2.b), destroem a ordem translacional a *qualquer* temperatura finita, mas não são suficientes para descorrelacionar orientações das camadas/faixas. Levam o sistema de uma fase esmética ou colestérica em $T = 0$, a uma fase nemática com ordem orientacional apenas.

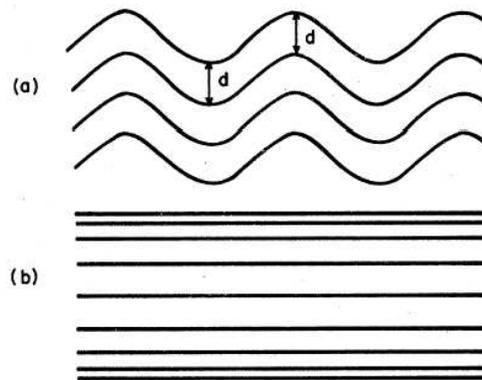


Figura 2.2: diferentes tipos de excitações de fônon, que são basicamente deslocamentos ou perturbações nas paredes das faixas.[10]

2. os defeitos topológicos quebram a ordem orientacional via desligamento de pares de defeitos. Diferente de cristais bidimensionais, pares de dislocações (fig. 2.3) estão sempre dissociados. Os pares de disclinações (fig. 2.4.b, 2.4.c), ao contrário, estão ligados a baixas temperaturas e sua descorrelação leva o sistema a fase isotrópica via uma transição contínua.

Modelos para filmes finos

Nesse contexto, Garel e Doniach (1982) [13] usaram um modelo contínuo do tipo Landau-Ginzburg² para um filme fino com anisotropia uniaxial forte, do tipo Ising, e com a interação dipolar (2.3) modificada para levar em conta o efeito da espessura.

Eles identificaram o sistema como pertencendo a mesma classe dos sistemas considerados por Brazovskii e que, portanto, sofre uma transição de primeira ordem induzida por flutuações de natureza direcional.

Ao considerar as contribuições elásticas das interações de seu modelo, verificaram que a ordem orientacional se perderia em uma transição mediada por defeitos via desligamento de disclinações. Além disso, pares de dislocações estão sempre dissociados a temperatura finita e portanto a ordem posicional só aparece em $T = 0$.

Entretanto, eles não puderam afirmar a princípio se o desligamento de disclinações ocorre antes ou depois da temperatura de transição de primeira ordem prevista pela abordagem de Brazovskii.

O mais detalhado e completo estudo das diferentes fases de uma rede bidimensional de paredes de domínio foi feito por Abanov, Kalatsky, Pokrovsky e Saslow (1995) [14] consi-

²como será visto mais adiante, um modelo semelhante ao estudado aqui.

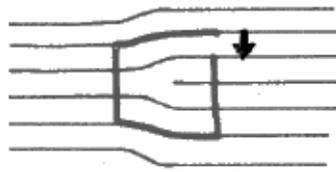


Figura 2.3: dislocação em sistemas de faixas. A intensidade de uma dislocação é medida pelo seu vetor de Burgers, definido por o quanto um circuito em torno da dislocação falha em fechar [12]. Sua geometria caracteriza um defeito translacional.

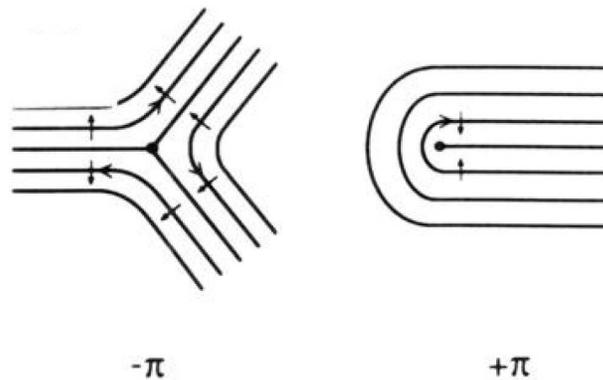


Figura 2.4: disclinações em sistemas de faixas. Uma carga pode ser assinalada a esses defeitos notando que um vetor normal às faixas executa uma rotação de $\pm\pi$ em um circuito em torno da disclinação $+$ ou $-$ [5]. Uma disclinação $+$ ($-$) também é denominada côncava (convexa) e suas geometrias as caracterizam como defeitos orientacionais.

derando uma versão contínua do modelo de Heisenberg em termos das energias elásticas das paredes de domínio feita por Kashuba e Pokrovsky (1993) [15].

Um das principais diferenças entre esse modelo e os anteriores é a presença de uma anisotropia espacial, gerada pelas direções preferenciais da energia de troca, que fixa as orientações possíveis das faixas em duas direções mutuamente perpendiculares.

Isso leva, a baixas temperaturas, a flutuações do tipo fônon (fig. 2.2) e outras sinuosidades nas paredes das faixas não quebrarem a ordem posicional e dislocações estarem presentes sempre aos pares. Devido a ordem dessa fase de baixas temperaturas lembrar a de um cristal líquido esmétrico, a fase é chamada de *cristal esmétrico*.

Outra consequência é a fase líquida não ser isotrópica, e sim ter duas direções mutuamente perpendiculares e igualmente prováveis. Devido essa simetria, a fase líquida é chamada *líquido tetragonal*. Ela é formada por domínios de faixas em direções perpendiculares, separados por o que chamaram de "paredes de domínio de rotação de faixas".

Segundo os autores, a medida que a temperatura aumenta, a passagem entre essas duas fases pode se dar pelas seguintes maneiras:

1. os pares ligados de dislocações se tornam mais comuns até que uma transição con-

tínua mediada pela proliferação de dislocações desligadas ocorre e a ordem posicional é perdida. Como a ordem orientacional persiste e apenas duas direções são favorecidas, essa fase intermediária é denominada *fase Ising nemática*. A perda de ordem orientacional na passagem para a fase de líquido tetragonal ocorre via proliferação das paredes de domínio de rotação de faixas, provavelmente numa transição contínua da mesma classe de Ising.

2. a fase Ising nemática pode ser instável e o sistema passar da fase de cristal esmético a de líquido tetragonal via uma transição de primeira ordem.

Simulações de Monte Carlo

Além de estudos analíticos como os mencionados acima, simulações de Monte Carlo do modelo de Ising-dipolar numa rede quadrada também têm sido importantes para estudar a natureza das diferentes fases de equilíbrio em filmes finos.

Booth, Macisaac, Whitehead e De’Bell (1995) [16] identificaram, através do calor específico e de um parâmetro de ordem orientacional, que a fase de faixas de baixas temperaturas, análoga ao cristal esmético, sofre uma transição de segunda ordem para o líquido tetragonal, em oposição a de primeira ordem esperada por Abanov *et al.* Eles não encontraram evidências de uma fase Ising nemática, mas apontaram que a possibilidade de uma transição de primeira ordem fraca não podia ser descartada de suas simulações de Monte Carlo.

Stoycheva e Singer (2002) [17] em uma simulação sob uma rede triangular observaram, também em medidas do calor específico e de um parâmetro de ordem orientacional, algumas evidências de uma transição contínua mediada por defeitos.

Recentemente, Cannas, Stariolo e Tamarit (2004) [18] obtiveram, através de um estudo de tamanhos finitos do calor específico e do cumulante de Binder de quarta ordem e de histogramas de energia, evidências numéricas de uma transição de primeira ordem fraca entre o cristal esmético e o líquido tetragonal, em acordo com as previsões teóricas de Abanov *et al.*

2.2 Resultados Experimentais

Dentre os trabalhos experimentais em filmes finos de metais sobre metais, os que dizem respeito às diferentes fases de domínios foram feitos por Vaterlaus, Stamm, Maier, Pini, Politi e Pescia (2000) [19] e Portmann, Vaterlaus e Pescia (2003) [20]. Ambos foram em

filmes de Fe com estrutura f.c.c. (cúbica de face centrada) sobre Cu(001) visualizados por uma técnica de microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização (SEMPA).

Com espessuras variando em torno de 2 monocamadas, Portmann *et al.* obtiveram imagens detectando uma fase de baixas temperaturas³ com ordem orientacional na presença de dislocações, geralmente em pares, e que pode ser visualizada na figura (fig. 2.5). Eles identificaram essa fase como a do tipo esmético prevista por Abanov *et al.*

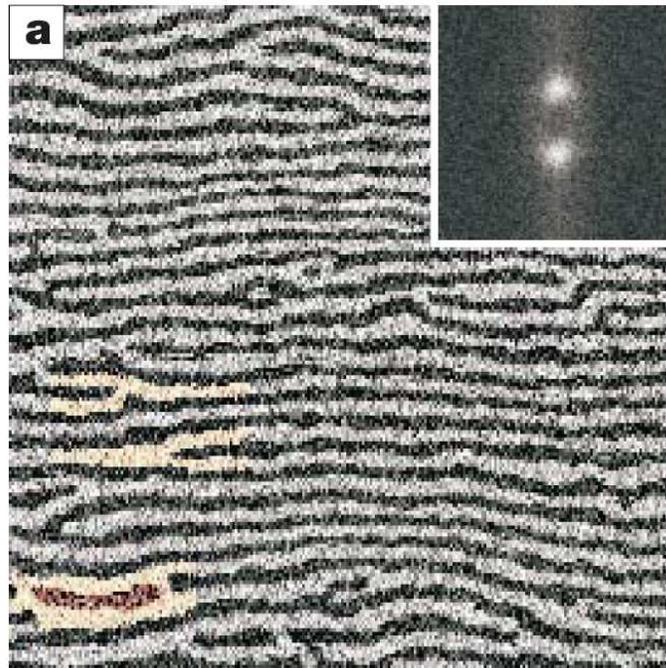


Figura 2.5: fase de baixas temperaturas com diversas dislocações. Em detalhe o fator de estrutura indicando que as faixas possuem ordem direcional local [20].

Eles mostraram que a perda de ordem orientacional é iniciada pela emissão de "dedos" e "galhos" das faixas (fig. 2.6), que promovem um padrão labiríntico (fig. 2.7) formado por uma rede conectada de domínios contendo dois tipos de defeitos: disclinações côncavas e convexas.

Um dos resultados que mais lhes chamou a atenção foi o de uma transição inversa em que o sistema vai de uma fase mais simétrica (menos ordenada) a baixas temperaturas para uma menos simétrica a medida que a temperatura aumenta. Essa transição pode ser visualizada em (fig. 2.8).

Anteriormente, Vaterlaus *et al.* mostraram (em filmes de até 5 monocamadas) quatro tipos de dislocações e outros dois tipos defeitos suportados pelas faixas que não foram previstos teoricamente (fig. 2.9).

³aqui a temperatura efetiva é controlada pela temperatura ambiente e pela espessura do filme

Figura 2.6: abaixo, o processo de perda de ordem orientacional. A temperatura efetiva cresce de b-d.

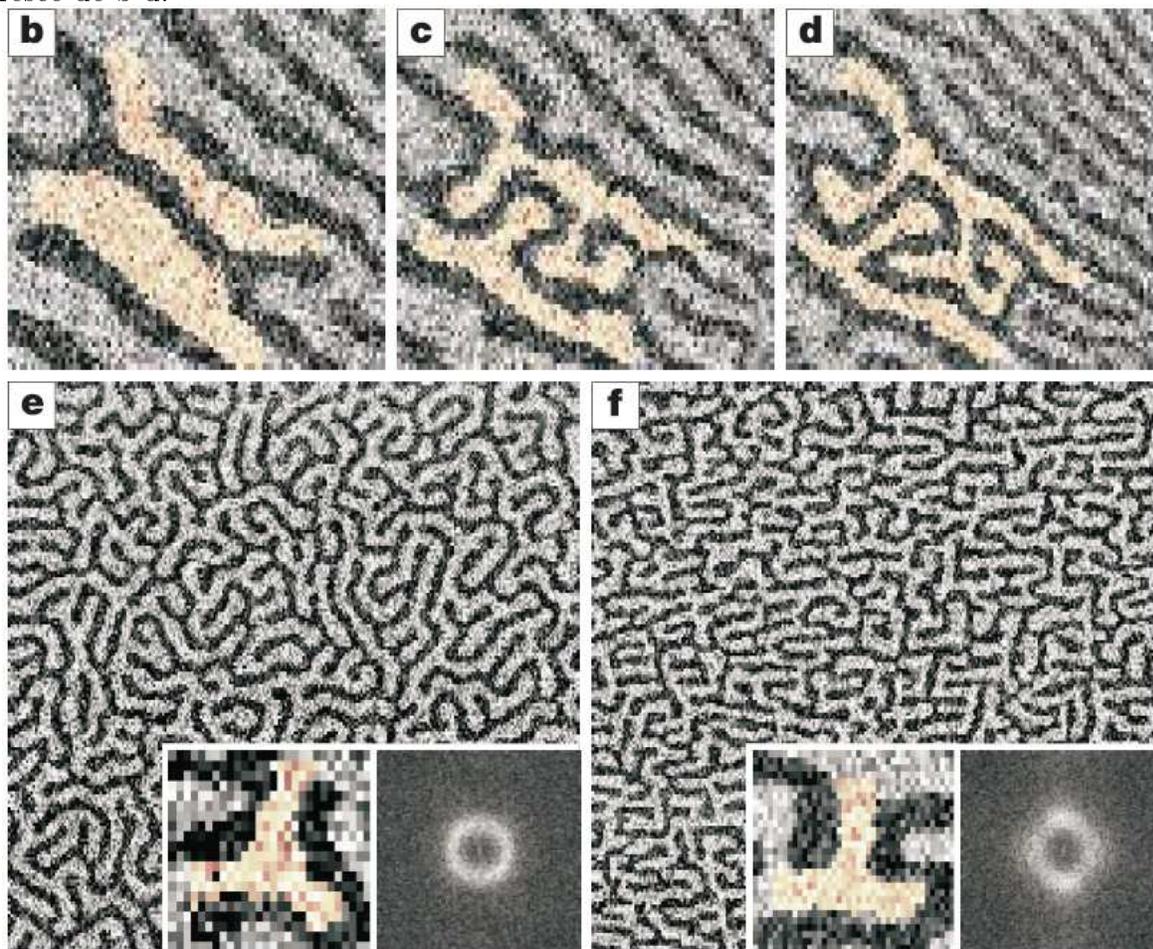


Figura 2.7: padrões labirínticos. Nos detalhes uma ampliação de uma disclinação côncava e o fator de estrutura.

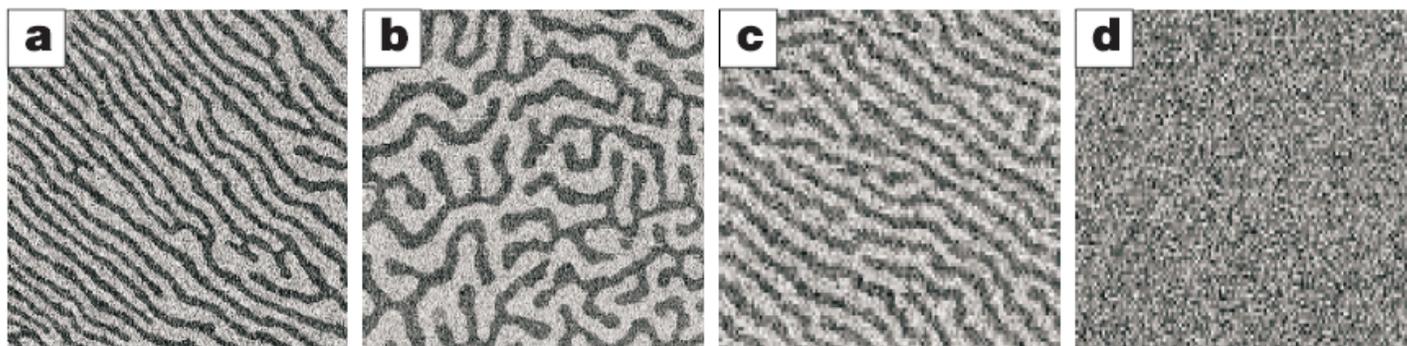


Figura 2.8: transição inversa: a temperatura efetiva aumenta de a-d, numa sequência de padrão de faixas, padrão labiríntico, novamente o padrão de faixas e a fase paramagnética.

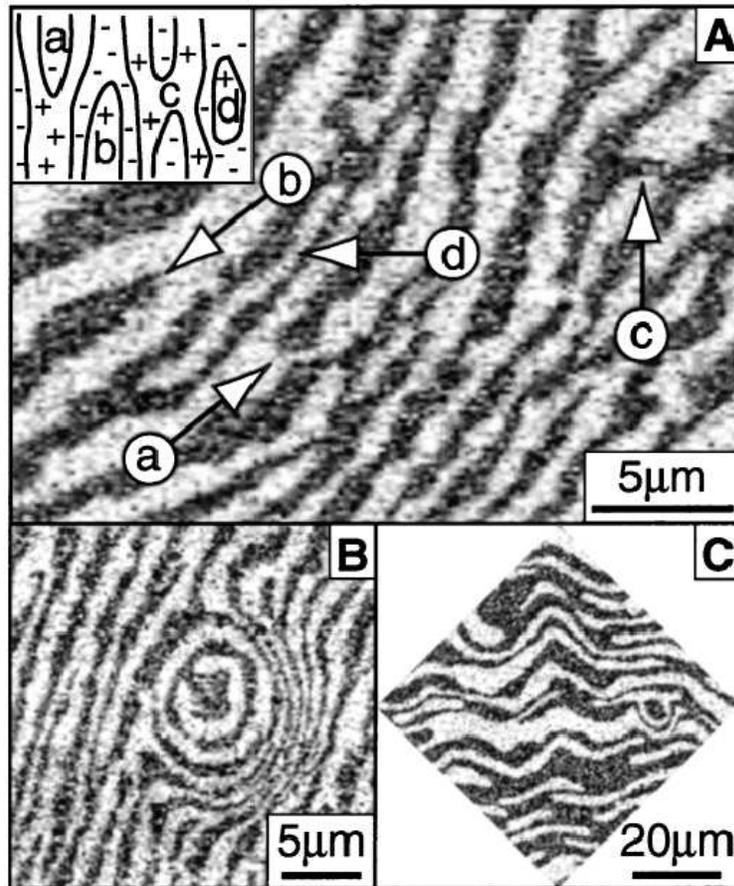


Figura 2.9: em (A) as diferentes dislocações sugeridas por Abanov *et al.* apontadas no detalhe. Em (B) um defeito circular, do tipo alvo. Em (C), defeitos do tipo "chevron".

2.3 O Modelo Dipolar Contínuo

Concentrando-se apenas no diagrama de fases do sólido bidimensional de paredes de domínio, portanto nas fases moduladas a temperatura finita, o caso de Heisenberg não difere muito do caso de Ising. De fato, no limite em que a largura das faixas é muito maior que a espessura da parede de domínio, é possível substituir os domínios de Heisenberg separados por paredes de Bloch, por domínios de Ising separados por paredes vazias [4].

Entretanto, simulações do modelo Ising-dipolar possuem alguns limites computacionais que comprometem comparações com sistemas reais e limita o estudo a tamanhos pequenos, e portanto a faixas de largura pequena.

No intuito de observar características em escalas maiores, estudamos uma versão contínua do modelo Ising-dipolar que enfatiza o papel do parâmetro de ordem - a magnetização.

Uma maneira de fazer isso é dividir o sistema em muitas células com dimensões grandes comparadas a qualquer comprimento microscópico tal que cada célula contenha um número grande de spins. Define-se então um campo do parâmetro de ordem, $\phi(\mathbf{x})$, como a média da magnetização de uma célula centrada em \mathbf{x} e que, como existem muitos spins em cada célula, pode ser tratada como uma variável real contínua.

Este processo de mediação em uma região do espaço é chamado *coarse graining* [2]. Uma transformação gaussiana na função de partição do hamiltoniano discreto [21] captura o procedimento descrito acima e o resultado é um hamiltoniano efetivo do tipo Landau-Ginzburg:

$$H[\phi] = \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{x} \left[(\nabla\phi(\mathbf{x}))^2 + r_0\phi^2(\mathbf{x}) + \frac{u}{2}\phi^4(\mathbf{x}) \right] + \frac{1}{2\delta} \int d^2\mathbf{x} \int d^2\mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}) J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \phi(\mathbf{x}') \quad (2.7)$$

O termo gradiente de curto alcance favorece um estado homogêneo (ferromagnético) e o termo dipolar de longo alcance:

$$J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} \quad (2.8)$$

favorece um estado antiferromagnético. Os termos ϕ^2 e ϕ^4 limitam a energia do sistema favorecendo um valor nulo de ϕ se $r_0 > 0$ ou dois valores equivalentes $\pm m$ se $r_0 < 0$.

Sendo $k_i = 2\pi l_i/L$, com $i = 1, 2$ e $l_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ os vetores de onda compatíveis com as condições de contorno periódicas e definindo as transformadas de Fourier como:

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (2.9)$$

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \int d^2\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (2.10)$$

o hamiltoniano (2.7) na representação de Fourier é:

$$H[\phi] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} A(k) \phi(\mathbf{k}) \phi(-\mathbf{k}) + \frac{u}{4L^2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \phi(\mathbf{k}_1) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k}_3) \phi(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \quad (2.11)$$

onde $A(k)$ é o espectro de flutuações

$$A(k) = r_0 + k^2 + \frac{J(k)}{\delta} \quad (2.12)$$

Formalismo geral

O formalismo geral para tratar desses sistemas em contato com um reservatório térmico é baseado na função de partição consistente com o processo de *coarse graining*:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi(\mathbf{x}) e^{-\beta H[\phi]} \quad (2.13)$$

que é na forma de uma integral funcional sobre todos os valores possíveis de $\phi(\mathbf{x})$ em todas posições \mathbf{x} . Essa integral também pode ser expressa no espaço de Fourier como:

$$Z = \int \left(\prod_{\mathbf{k}} d\phi(\mathbf{k}) \right) e^{-\beta H[\phi]} \quad (2.14)$$

Essa expressão geralmente não converge, a menos que seja assumido um *corte* nos vetores de onda: $k < \Lambda$, e que determina portanto um comprimento mínimo para o espaço. Em todas integrais no espaço, inclusive em (2.7), esse corte é tomado. Para campos ϕ representados em um espaço discreto, esse corte aparece naturalmente como a constante de espaçamento da rede.

Campo Médio

Em (2.13), as configurações que mais contribuem à função de partição são as que minimizam a energia (2.7):

$$\frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{x})} = 0 = -\nabla^2 \phi(\mathbf{x}) + r_0 \phi(\mathbf{x}) + u \phi^3(\mathbf{x}) + \frac{1}{\delta} \int d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}') J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \quad (2.15)$$

A aproximação de campo médio na expressão da função de partição (2.13) consiste em calcular as integrais funcionais tomar apenas essas configurações, o que equivale a tratar o hamiltoniano (2.7) como uma energia livre [2].

Da equação (2.15) no espaço de Fourier pode-se obter a forma da energia no seu mínimo:

$$H[\phi] = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} A(k) |\phi(\mathbf{k})|^2 \quad (2.16)$$

Agora, se $A(k)$ tem um mínimo absoluto em um valor $k_m \neq 0$, então a solução que minimiza a energia livre de Landau $H[\phi]$ é dada por:

$$\phi(\mathbf{k}) = Lm[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_m} + \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}_m}] \quad (2.17)$$

ou

$$\phi(\mathbf{x}) = 2m \cos(\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{x}) \quad (2.18)$$

caracterizando a fase modulada.

Para satisfazer a equação (2.15) no espaço de Fourier, a amplitude deve satisfazer:

$$A(k_m)m + 3um^3 = 0 \quad (2.19)$$

O valor de k_m é independente da temperatura porque ele é determinado pela condição de que seja um mínimo do espectro de flutuações:

$$\left. \frac{dA(k)}{dk} \right|_{k_m} = k_m + \frac{1}{\delta} \left. \frac{dJ(k)}{dk} \right|_{k_m} = 0 \quad (2.20)$$

Assim, a temperatura crítica é dada pela condição $A(k_m, T_c) = 0$, ou

$$r_0(T_c) \equiv r_0^c = -(k_m^2 + \frac{J(k_m)}{\delta}) \quad (2.21)$$

e a amplitude da fase modulada abaixo de T_c é dada por

$$m = \sqrt{\frac{-A(k_m)}{3u}} \quad (2.22)$$

expandindo $r_0(T) = r_0^c + a(T - T_c)$, com $a > 0$, fica caracterizada a transição de fases de segunda ordem:

$$m = \sqrt{\frac{a(T - T_c)}{3u}} \quad (2.23)$$

onde a modulação cresce abaixo da transição continuamente a partir da solução paramagnética $m = 0$.

A abordagem de Brazovskii

Como um primeiro passo para incluir flutuações ao estudo de campo médio, pode-se usar a aproximação de campo auto-consistente, de Hartee ou de fase aleatória, que consiste em tomar uma forma gaussiana do hamiltoniano (2.7) substituindo um fator ϕ^2 do termo ϕ^4 pela sua média $\langle \phi^2 \rangle$ e determiná-la autoconsistentemente.

Essa aproximação foi usada por Brazovskii (1975) [9] para observar, em um sistema com um mínimo em $A(k)$, que a transição de uma fase isotrópica a uma fase modulada era de primeira ordem, ao contrário do previsto em campo médio.

Recentemente, Cannas *et al.* (2004) [18] observaram que o modelo dipolar contínuo do hamiltoniano (2.7) pertence a mesma classe do caso de [9]. Utilizando uma aproximação

de Hartree para o hamiltoniano (2.7), eles mostraram que como o espectro de flutuações é isotrópico, ele pode ser minimizado em um contínuo de direções com vetor de onda k_m . Essa forte degenerescência nas direções fazem com que a fase paramagnética seja metaestável até temperatura zero, caracterizando uma transição de primeira ordem.

Como a compreensão da natureza das transições e das fases termodinâmicas deste modelo estão limitadas a aproximações perturbativas (que em primeira ordem já introduzem mudanças qualitativas ao caso de campo médio) é interessante estudar este modelo através de simulações computacionais da dinâmica em contato com um reservatório térmico. A dinâmica proposta nesta dissertação é a *dinâmica de Langevin*, que, juntamente com o método utilizado para sua implementação numérica, será o tema do próximo capítulo.

Capítulo 3

Dinâmica 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 atuariam como uma força dirigindo seu movimento rápido e errático (força estocástica), o que levaria a uma força friccional (força sistemática) atuar 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 [22].

A equação de Newton proposta foi:

$$m \frac{dv}{dt} = -\frac{v}{B} + F(t) \quad (3.1)$$

onde o primeiro termo é a força devido a 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 as colisões é nula:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (3.2)$$

2. As colisões sucessivas são independentes, ou descorrelacionadas:

$$\langle F(t)F(t') \rangle = C\delta(t - t') \quad (3.3)$$

onde C mede a intensidade da força estocástica e $\langle \rangle$ é a média em 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 (3.1) para a velocidade média e a velocidade quadrática média a tempos longos (após a relaxação inicial devido o 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:

$$C = \frac{2k_B T}{B} \quad (3.4)$$

conhecida como *relação de Einstein*, quem a derivou de outra maneira 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 a temperatura T [23].

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 [24]. Para um primeiro passo na aplicação da equação de Langevin a outros casos, reescreve-se (3.1) em termos do momentum e do hamiltoniano da partícula browniana:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{p}{mB} + F(t) = -\Gamma \frac{\partial H}{\partial p} + F(t) \quad (3.5)$$

onde $\Gamma \equiv 1/B$.

A generalização para outras variáveis reais contínuas $\phi(\mathbf{x})$ com hamiltoniano H , torna possível reescrever a equação de Langevin (3.5) para cada posição \mathbf{x} :

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (3.6)$$

com

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad (3.7)$$

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = C \delta(t - t') \delta^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.8)$$

$$C = 2\Gamma k_B T \quad (3.9)$$

onde a relação de flutuação-dissipação é a condição para que o estado assintótico esteja em equilíbrio com o banho térmico, como será ressaltado mais adiante. $\eta(t)$ é uma variável estocástica independente para cada posição no espaço usualmente chamada de *ruído branco*, que por ser descorrelacionado no tempo tem uma distribuição de probabilidades

gaussiana. O termo "branco" é porque seu espectro de frequências, a transformada de Fourier no tempo da equação (3.8) ou da (3.3), contém todas as frequências possíveis por igual, tal como a luz branca [23].

A equação de Langevin (3.6,3.8) também pode ser usada para derivar as equações dinâmicas que determinam toda função de distribuição de probabilidades para as variáveis do sistema [2].

A equação dinâmica correspondendo à densidade de probabilidade $W(\{\phi(\mathbf{x})\}, t)$, que é a probabilidade por unidade de volume do espaço de configurações para que as variáveis $\phi(\mathbf{x})$ tomem dados valores no tempo t , é chamada de equação de Smoluchowski, ou de equação de Fokker-Planck, [21] e é escrita como:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \int d^d x \frac{\delta}{\delta \phi(\mathbf{x})} \left[\Gamma W \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \frac{C}{2} \frac{\delta W}{\delta \phi(\mathbf{x})} \right] \quad (3.10)$$

Supondo que o sistema esteja em equilíbrio térmico e então obedeça uma distribuição estacionária de Gibbs:

$$W_G(\{\phi(\mathbf{x})\}) \propto \exp[-\beta H[\phi]],$$

a equação (3.10) para essa distribuição é:

$$\frac{\partial W_G}{\partial t} = 0 = \int d^d x \frac{\delta}{\delta \phi(\mathbf{x})} \left[\left(\Gamma - \frac{1}{2} \beta C \right) W_G \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} \right] \quad (3.11)$$

e a condição para que a distribuição de probabilidades de Gibbs seja solução da equação (3.11) é que Γ e C satisfaçam a relação de flutuação-dissipação (3.9). Ainda é possível mostrar que a distribuição de probabilidades na equação de Smoluchowski (3.11) sempre tende a distribuição de equilíbrio [21].

Como um formalismo válido para tratar sistemas que trocam energia com o ambiente, a dinâmica do modelo dipolar contínuo pode ser descrita pela equação de Langevin (3.6), usando a forma do hamiltoniano em (2.7) para obter:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) - r_0 \phi(\mathbf{x}) - u \phi^3(\mathbf{x}) - \frac{1}{\delta} \int d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}') J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (3.12)$$

no espaço real, ou no espaço de Fourier como:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{k})}{\partial t} = -\phi(\mathbf{k}) A(k) - \frac{u}{L^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \phi(\mathbf{k}_1) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + \eta(\mathbf{k}, t) \quad (3.13)$$

3.1 Estabilidade Linear a Temperatura Zero

A solução modulada do tipo modo-único (como um cosseno puro) obtida em campo médio no capítulo anterior é uma solução da equação de Langevin a temperatura zero. Isso pode ser verificado na equação de Langevin (3.6) lembrando que a energia é um mínimo para essa solução e portanto $\frac{\delta H}{\delta \phi} = 0$.

Para analisar a estabilidade dessa solução, perturba-se ela em um modo arbitrário \mathbf{k} :

$$\phi(\mathbf{k}, t) = \phi^*(\mathbf{k}) + \delta\phi(\mathbf{k}, t) = Lm[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_m} + \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}_m}] + \delta\phi(\mathbf{k}, t) \quad (3.14)$$

Substituindo na equação (3.13) e desprezando os termos não-lineares em $\delta\phi(\mathbf{k}, t)$, obtém-se:

$$\frac{\partial \delta\phi(\mathbf{k})}{\partial t} = -A(k)\delta\phi(\mathbf{k}) - 3u m^2 [\delta\phi(\mathbf{k} + 2\mathbf{k}_m) + 2\delta\phi(\mathbf{k}) + \delta\phi(\mathbf{k} - 2\mathbf{k}_m)] \quad (3.15)$$

De onde é possível estudar a estabilidade das diferentes soluções:

Para a solução paramagnética, $m = 0$, obtém-se:

$$\delta\dot{\phi}(\mathbf{k}) = -A(k)\delta\phi(\mathbf{k}) \quad (3.16)$$

isto é, a solução paramagnética é estável frente a perturbação em um modo arbitrário se $A(k)$ para esse modo for positivo.

A estabilidade das soluções ordenadas com $m^2 = -A(k_m)/3u$ pode ser analisada frente a diversos tipos de perturbação. O caso mais imediato é analisar a estabilidade da solução frente a uma perturbação na sua amplitude, isto é:

$$\delta\phi(\mathbf{k}, t) = \delta\phi(t) (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_m} + \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}_m}) \quad (3.17)$$

O que, substituindo na equação (3.15), leva a:

$$\delta\dot{\phi}(t) (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_m} + \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}_m}) = -A(k)\delta\phi(t) (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_m} + \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}_m}) - 3u m^2 (\delta_{\mathbf{k}, 3\mathbf{k}_m} + \delta_{\mathbf{k}, -3\mathbf{k}_m} + 3\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_m} + 3\delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}_m}) \delta\phi(t) \quad (3.18)$$

que, para $\mathbf{k} = \pm\mathbf{k}_m$:

$$\delta\dot{\phi}(t) = -[A(k_m) + 9u m^2] \delta\phi(t) = 2A(k_m)\delta\phi(t) \quad (3.19)$$

Isto é, as soluções ferromagnética ($k_m = 0$) e modo-único ($k_m \neq 0$) são estáveis frente

a perturbações na amplitude se $A(k_m)$ for negativo.

Esses resultados, como se esperava pela condição de que as soluções ferromagnética e modo-único fossem reais, sugerem que os parâmetros r_0 e δ devem ser ajustados para comportar uma solução estável. Como r_0 é uma constante aditiva em $A(k)$, a estabilidade de uma solução pode ser facilmente atingida variando esse parâmetro.

Em (fig. 3.1), o espectro de flutuações $A(k)$ sem o fator aditivo r_0 é graficado para simulações da equação de Langevin (3.12) discretizada a temperatura zero (que serão detalhadas na seção 3.2), com tamanho linear $L = 128$, $u = 1$ e $\delta = 4.67$, onde a solução de modo $k_m = \pi/8$ é estável para valores suficientemente negativos de r_0 . Os valores negativos de r_0 usados nas figuras seguintes para ilustrar as soluções de modo $k_m = \pi/8$ foram graficados em linhas horizontais de valor $|r_0|$. A constante de discretização espacial foi tomada como $a = 1$.

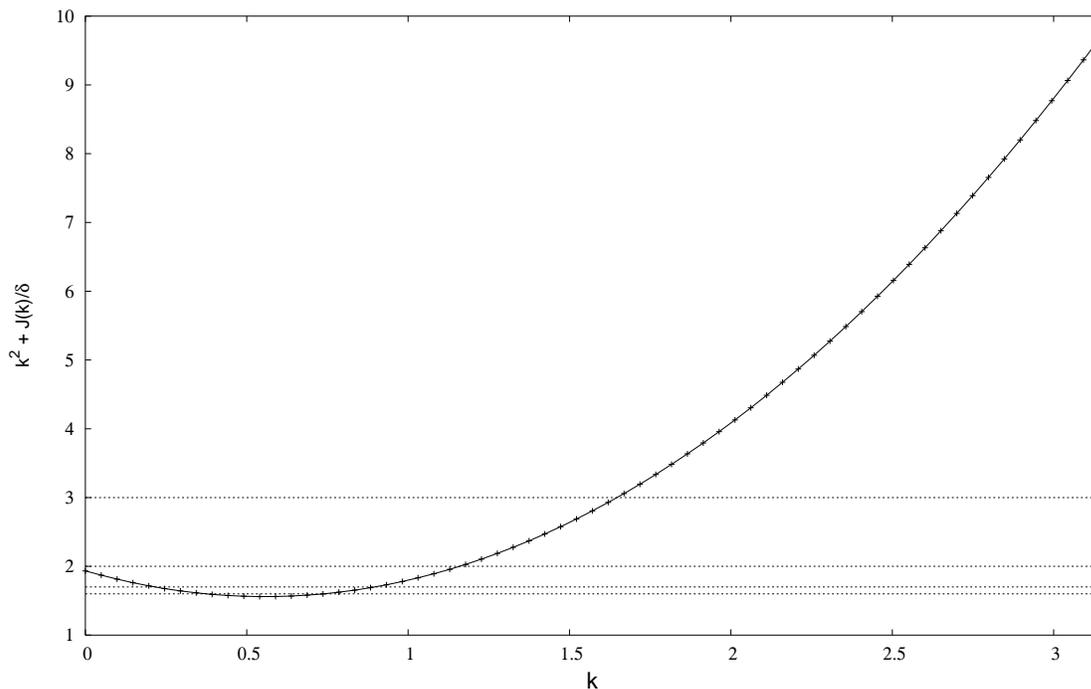


Figura 3.1: $A(k)$ sem o fator r_0 . Os valores constantes correspondem aos valores escolhidos de $-r_0 = 1.6, 1.7, 2$ e 3 .

Para valores positivos ou pouco negativos de r_0 , a solução estacionária é a paramagnética $\phi = 0$. Diminuindo o valor de $r_0 < 0$ (aumentando seu valor absoluto), as soluções estacionárias de modo $k_m = \pi/8$, além de aumentarem suas amplitudes a partir de $\phi_0 = 0$ como se espera, têm a forma de suas ondas modificadas. Na figura (fig. 3.2) se observa que as modulações passam de ondas senoidais para ondas mais quadradas a medida em que $|A(k_m)|$ aumenta com os valores de r_0 apontados na figura (fig. 3.1).

As formas das ondas são alteradas pela inclusão de harmônicos ímpares à solução

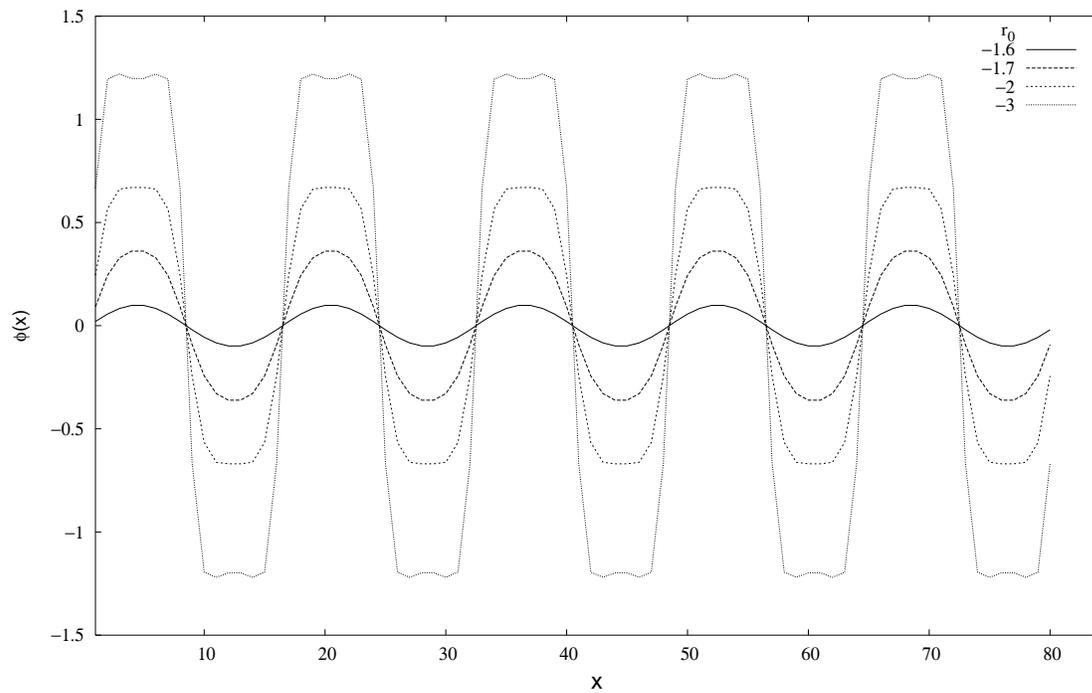


Figura 3.2: Corte transversal das soluções para os diferentes valores de r_0 apontados na figura (fig. 3.1).

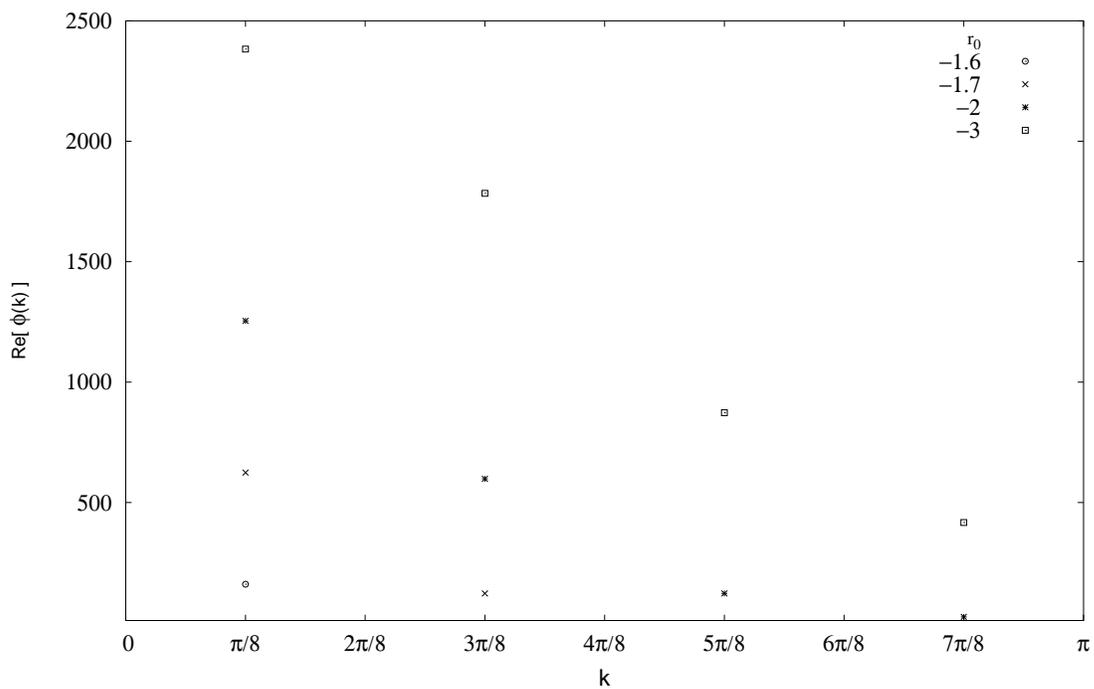


Figura 3.3: Parte real da transformada de Fourier das soluções na (fig. 3.2). Observa-se a contribuição crescente dos harmônicos ímpares à solução de modo-único.

de modo-único, como se observa na (fig. 3.3) na parte real da transformada de Fourier das soluções na (fig. 3.2). O modo dominante, entretanto, ainda é o de $k_m = \pi/8$ correspondente ao mínimo de $A(k)$.

A validade da solução de modo-único para equações do tipo (3.13) onde o espectro de flutuações tem um mínimo em um vetor de onda $k_m \neq 0$ foi levantada por Pomeau e Manneville (1979) [25], que estudaram as soluções de um modelo para a convecção de Rayleigh-Bénard, onde o espectro de flutuações tem a forma $A_{sh}(k) = -\epsilon + (k^2 - k_m^2)^2$. Eles derivaram contribuições de harmônicos ímpares à solução em uma análise que segundo eles poderia ser estendida a formas mais gerais de $A(k)$ com um mínimo em $k_m \neq 0$.

As soluções numéricas apresentadas na figura (figs. 3.2) estão de acordo com seus resultados, onde a solução de modo-único é uma boa aproximação para valores de ϵ muito pequenos, isto é, para $A_{sh}(k_0) \lesssim 0$.

3.2 Integração Numérica

3.2.1 Parâmetros Adimensionais

Para estudar a equação de Langevin com o menor número possível de parâmetros relevantes ao problema, é conveniente reescalar [26] a equação (3.12) e o hamiltoniano (2.7) de forma a conterem parâmetros adimensionais.

Supondo que $r_0 < 0$, tal que o hamiltoniano tenha dois mínimos equivalentes em valores de $\phi \neq 0$, as seguintes transformações:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\rightarrow \mathbf{x}\sqrt{|r_0|} \\ \phi &\rightarrow \phi\sqrt{|r_0|} \\ t &\rightarrow t|r_0| \end{aligned} \quad (3.20)$$

levam a reescrever a eq. (3.12) como:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) + \phi(\mathbf{x}) - \phi^3(\mathbf{x}) - \frac{1}{\delta'} \int d^2 \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}') J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (3.21)$$

com:

$$\begin{aligned} \delta' &= \delta|r_0|^{1/2} \\ T' &= T|r_0| \end{aligned} \quad (3.22)$$

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

com o mesmo conjunto de transformações, o hamiltoniano (2.7) se torna:

$$H'[\phi] = \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{x} \left[(\nabla\phi(\mathbf{x}))^2 - \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\phi^4(\mathbf{x}) \right] + \frac{1}{2\delta'} \int d^2\mathbf{x} \int d^2\mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}) J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \phi(\mathbf{x}') \quad (3.23)$$

onde a energia é reescalada como:

$$H'[\phi] = \frac{u}{r_0} H[\phi] \quad (3.24)$$

Para evitar uma notação pesada, daqui em diante os parâmetros adimensionais são escritos sem a linha '.

Embora a dependência única em δ pareça evidente nas equações acima, o papel de r_0 visto na última seção em ajustar a estabilidade e a forma da solução é transportado através da transformação (3.20) ao espaço e em especial, ao comprimento de onda de corte nas integrais $\int d^2\mathbf{x}$, equivalente à constante de espaçamento da rede do campo $\phi(\mathbf{x})$ no espaço discretizado.

3.2.2 Discretização Espacial

A discretização espacial é feita sob uma rede quadrada de constante a tal que o espaço discreto seja descrito por:

$$\mathbf{x} = a\mathbf{n} = a(i\hat{e}_x + j\hat{e}_y), \quad (3.25)$$

com $i, j = 1, 2, \dots, N$ e \hat{e}_x e \hat{e}_y são os vetores unitários dos eixos cartesianos da rede.

De maneira geral, a passagem do contínuo ao discreto pode ser sintetizada pelas seguintes substituições:

$$L = aN, \quad \int d^2\mathbf{x} \rightarrow a^2 \sum_{\mathbf{x}} \quad (3.26)$$

Aplicando-as na equação (3.23), o hamiltoniano adimensional é reescrito como:

$$H[\phi] = \frac{a^2}{2} \sum_{\mathbf{x}} \left[(\nabla_{\mathbf{x}}\phi(\mathbf{x}))^2 - \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\phi^4(\mathbf{x}) + \frac{a^2}{\delta} \sum_{\mathbf{x}'} \phi(\mathbf{x}) J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \phi(\mathbf{x}') \right] \quad (3.27)$$

onde $\nabla_{\mathbf{x}}$ é o gradiente discretizado na rede.

Se as transformadas de Fourier forem redefinidas para o espaço discreto como:

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{x}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ \phi(\mathbf{k}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ \mathbf{k} &= \frac{2\pi}{aN} (l_x \hat{e}_x + l_y \hat{e}_y),\end{aligned}$$

o hamiltoniano adimensional (3.27) na representação de Fourier fica:

$$H[\phi] = \frac{a^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{k}) \phi(-\mathbf{k}) + \frac{a^2}{4N^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \phi(\mathbf{k}_1) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k}_3) \phi(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \quad (3.28)$$

Com

$$A(k) \equiv k^2 - 1 + \frac{a^2}{\delta} J(k) \quad (3.29)$$

onde a transformada de Fourier da forma discretizada do laplaciano na rede em (3.28) foi tomada em sua forma isotrópica: k^2 .

Condições de Contorno

Afim de observar propriedades que sugerem o comportamento de uma amostra de tamanho macroscópico, simulações de amostras finitas devem ser feitas de maneira a minimizar efeitos de tamanho finito, tal que a medida que os tamanhos creçam em direção ao limite termodinâmico o efeito das bordas sejam desprezíveis.

Uma das conseqüências do caráter de longo alcance da interação dipolar, até mesmo a nível experimental, é justamente o forte efeito da forma da amostra. Para minimizar esse efeito, as interações foram calculadas contando com infinitas réplicas do sistema. Tem-se então um sistema infinito dividido em células de tamanho $L \times L$ com condições de contorno periódicas, onde um campo $\phi(\mathbf{x})$ na célula original interage com as infinitas réplicas do sistema (inclusive dele mesmo).

Como a interação ferromagnética é de curto alcance, basta a interação com os vizinhos nas primeiras réplicas, o que equivale a ter condições de contorno periódicas no próprio sistema. Já que a interação será sempre tratada no espaço de Fourier, essa condição é automaticamente satisfeita pela forma discreta do vetor de onda \mathbf{k} .

Já para a interação dipolar, as somas sobre as infinitas réplicas é lentamente convergente. Para contornar esse problema, aplica-se o método das somas de Ewald, desenvolvido originalmente para sistemas de partículas carregadas interagindo via potencial de Coulomb. O método das somas de Ewald para o caso de interações dipolares está desenvolvido

na literatura [6]. Como as distâncias entre os sítios da rede se mantêm 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.

Na prática, o que é feito na simulação é calcular a energia local de um sítio no espaço de Fourier. Isso se faz por duas razões: a primeira é tomar a forma isotrópica do laplaciano discretizado na rede e portanto não se restringir a aproximações de diferença finita em primeiros ou segundos vizinhos. Como será colocado na próxima seção, essa forma do laplaciano facilita a integração temporal.

Em segundo, como a contribuição da interação dipolar é em N^2 produtos para cada um dos N^2 sítios da rede (um processo da ordem de N^4 operações), é menos custoso computacionalmente transformar $\phi(\mathbf{x})$ para o espaço recíproco, multiplicar pela transformada de Fourier da interação dipolar (calculada uma só vez no início da simulação), e então transformar de volta ao espaço real, isto é:

$$\sum_{\mathbf{x}'} \phi(\mathbf{x}') J(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k}) J(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = [\phi(\mathbf{k}) J(\mathbf{k})]_{\mathbf{x}}^{F^{-1}} \quad (3.30)$$

(onde $]_{\mathbf{x}}^{F^{-1}}$ é a componente \mathbf{x} da anti-transformada de Fourier), já que rotinas de FFT (transformadas rápidas de Fourier) diminuem consideravelmente o tempo de transformação.

Rotinas usuais [30] usam algoritmos para tamanhos lineares que são potência de 2 e que custam da ordem de $N \log_2 N$ operações para cada dimensão, tornando o cálculo da energia dipolar de $O((N \log_2 N)^2)$. Esse custo computacional é diminuído em até 4 vezes utilizando a biblioteca FFTW para transformadas de Fourier discretas [31], 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 discretizado ($\mathbf{x} = a\mathbf{n}$, com $\mathbf{n} = i\hat{e}_x + j\hat{e}_y$) se dá por:

$$\delta^2(a\mathbf{n} - a\mathbf{n}') = \frac{1}{a^2} \delta^2(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \equiv \frac{1}{a^2} \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \quad (3.31)$$

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 $\xi(t)$ tem uma distribuição de probabilidades gaussiana de variância σ e outra variável $\mu(t)$ tem variância unitária, os dois processos se equivalem por $\xi(t) = \sqrt{\sigma} \mu(t)$.

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 gaussianas de variância unitária [30]. 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 (3.13) no espaço discretizado e com parâmetros adimensionais, escrita aproximadamente como na maneira implementada numericamente, é:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\phi(\mathbf{k}, t) \left[k^2 - 1 + \frac{a^2}{\delta} J(k) \right] + \left[-\phi^3(\mathbf{x}, t) + \sqrt{\frac{2T}{a^2}} \mu(\mathbf{x}, t) \right]_{\mathbf{k}}^F \quad (3.32)$$

Onde $]_{\mathbf{k}}^F$ significa a componente \mathbf{k} da transformada de Fourier, e o ruído branco μ obedece: $\langle \mu(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$ e $\langle \mu(\mathbf{x}, t) \mu(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta(t - t') \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}$.

Ao transformar para o espaço de recíproco o termo $\phi^3(\mathbf{x})$, além do próprio campo $\phi(\mathbf{x})$, evita-se a necessidade de calcular um duplo somatório como na equação (3.13), o que seria tão custoso quanto calcular a energia dipolar no espaço real.

3.2.3 Método de Integração Temporal

A maneira com que a equação diferencial parcial estocástica (3.32) 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 (3.32) em passos finitos do tempo Δt e o do campo $\Delta \phi$, o que leva a equações algébricas para a mudança em ϕ quando a variável independente t é aumentada em Δt . 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 [30].

Como o custo computacional basicamente limita o tamanho da rede e a região de parâmetro com determinados tempos característicos, como o tempo para equilibrar, um algoritmo que usa apenas uma equação algébrica é preferível aos de ordem mais alta com mais de uma equação, mesmo sendo mais instável e impreciso.

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 as muitas maneiras de tratar a derivada temporal de primeira ordem frente ao termo difusivo (o laplaciano), um método mais estável recomendado é o semi-implícito [30], onde o valor do termo difusivo é tomado no tempo posterior $t + dt$ e a interação dipolar no tempo t .

Alguns trabalhos anteriores de simulações de processos de ordenamento de fases em diferentes sistemas que possuem uma equação dinâmica para um campo escalar similar ao caso presente foram tomados como referência para a escolha do método de integração.

Algoritmos de ordem mais alta foram testados para simulações desses processos em um modelo do tipo Landau-Ginzburg com interações dipolares modificadas por um efeito de espessura [26], e também para um modelo Landau-Ginzburg com parâmetro de ordem conservado [27], onde não foi encontrada uma melhora significativa frente ao algoritmo de primeira ordem.

No entanto, um método explícito de primeira ordem é reconhecido ser muito sensível à escolha das constantes de discretização e ao efeito de ruído térmico [28].

Seguindo [27], com um esquema de diferenças finitas no espaço real, o tratamento semi-implícito do termo difusivo pode ser muito complicado. Além das vantagens já mencionadas, sua versão isotrópica no espaço recíproco (k^2) torna o emprego do método imediato.

Uma outra vantagem da atualização ser no espaço recíproco, juntamente com uma atualização *simultânea* em toda rede, é o uso das rotinas de FFT e da maneira simples em como o campo dipolar local (3.30) aparece no espaço de Fourier.

Por fim, a discretização temporal do ruído branco se dá pela mesma maneira que no caso espacial (3.31). Assim, o *método semi-implícito espectral de primeira ordem* utilizado aqui é empregado na equação (3.32) como:

$$\frac{\phi(\mathbf{k}, t + dt) - \phi(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\phi(\mathbf{k}, t)k^2 + \phi(\mathbf{k}, t) \left[-1 + \frac{a^2}{\delta} J(k) \right] + \left[-\phi^3(\mathbf{x}, t) + \sqrt{\frac{2T}{a^2 dt}} \mu(\mathbf{x}, t) \right]_{\mathbf{k}}^F \quad (3.33)$$

e se resume a seguinte equação algébrica:

$$\phi(\mathbf{k}, t + dt) = \frac{1}{1 + dt k^2} \left\{ \phi(\mathbf{k}, t) - dt \left(-1 + \frac{a^2}{\delta} J(k) \right) \phi(\mathbf{k}, t) + \left[-dt \phi^3(\mathbf{x}, t) + \sqrt{\frac{2T dt}{a^2}} \mu(\mathbf{x}, t) \right]_{\mathbf{k}}^F \right\} \quad (3.34)$$

com $\langle \mu(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$ e $\langle \mu(\mathbf{x}, t) \mu(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta_{t,t'} \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}$.

Em comparação com o método explícito onde o termo difusivo é tomado no tempo t , esse método se mostrou muito mais estável nas simulações. A estabilidade aqui depende essencialmente das constantes de discretização espacial a e temporal dt e de que a amplitude do campo ϕ não exceda um valor máximo, o que acaba limitando a intensidade do ruído, isto é, a temperatura.

Capítulo 4

Simulações

Ao longo desse capítulo, o estado fundamental correspondente à modulação do campo ϕ em uma direção com modo característico $k_m = \pi/ah$, onde a é a constante de rede, é denominado *faixa h* . Essa é a denominação usual no contexto de fases moduladas, inclusive nas simulações do modelo Ising dipolar.

As simulações do modelo dipolar contínuo são apresentadas aqui com medidas de grandezas como a energia (3.27) e dois parâmetros de ordem que são definidos adiante:

1. q_o correspondente a ordem orientacional das faixas e varia entre um para faixas ordenadas em uma única direção e zero para faixas orientadas em direções arbitrárias diferentes.

2. q_t correspondente a ordem translacional das faixas e varia entre um, para faixas com paredes de domínio retas e alinhadas, e zero, para faixas com grandes flutuações nas posições das paredes.

As duas ordens estão conectadas, como se pode perceber rotando uma região de faixas em relação ao estado de faixas perfeitas, ambas ordens são perdidas.

Além dessas quantidades, suas flutuações também são medidas para obter as derivadas correspondentes da função de partição [2]: o calor específico e as susceptibilidades dos parâmetros de ordem, calculados da seguinte maneira:

$$c = \frac{N^2}{T^2} (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2) \quad (4.1)$$

$$\chi_q = \frac{N^2}{T} (\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2) \quad (4.2)$$

onde e é a energia interna (3.27) por unidade de área e N^2 é o número de sítios da rede.

4.1 Parâmetro de Ordem Nemático

Para medir a ordem orientacional em sistemas escalares apresentando fase de faixas é preciso considerar o vetor diretor:

$$\hat{n}(\mathbf{x}) = \frac{\nabla\phi(\mathbf{x})}{|\nabla\phi(\mathbf{x})|} \quad (4.3)$$

nas paredes de domínio entre as faixas, como ilustrado na figura (fig. 4.1).

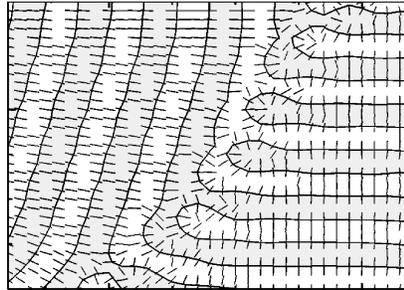


Figura 4.1: vetor diretor local nas paredes de domínio ilustrados como pequenas barras [32]

O vetor diretor fornece a orientação local, perpendicular à faixa. Ele foi utilizado por Christensen e Bray (1998) [32] para definir uma correlação espacial associada a ordem orientacional para o processo de ordenamento de faixas no modelo de Swift-Hohenberg. Quian e Mazenko (2003) [33], no mesmo contexto, utilizaram uma analogia com os cristais líquidos para definir essa mesma função de correlação em termos da função de correlação de um parâmetro de ordem nemático, semelhante ao que é apresentado aqui.

No espaço discretizado, o vetor diretor é calculado usando um esquema de diferenças finitas para o gradiente na rede:

$$\nabla_{\alpha}\phi(\mathbf{x}) \simeq \frac{\phi(\mathbf{x} - a\hat{e}_{\alpha}) - \phi(\mathbf{x} + a\hat{e}_{\alpha})}{2a} \quad (4.4)$$

onde α é a componente cartesiana do vetor diretor.

As paredes de domínio são localizadas através de uma função $\delta_{dw}(\mathbf{x})$, que vale 1 se o campo ϕ em \mathbf{x} tiver *primeiros* vizinhos com sinal contrário. Se o campo não tiver ao menos um vizinho de sinal oposto, $\delta_{dw}(\mathbf{x}) = 0$. Por exemplo, o número N_{dw} de sítios que se encontram em paredes de domínio pode ser obtido da soma:

$$N_{dw} = \sum_{\mathbf{x}} \delta_{dw}(\mathbf{x}) \quad (4.5)$$

Sendo assim, uma ordem global da rede de faixas pode ser definida considerando a seguinte quantidade:

$$q_o = \frac{1}{N_{dw}} \sum_{\mathbf{x}} \delta_{dw}(\mathbf{x}) \cos 2\theta(\mathbf{x}) \quad (4.6)$$

onde $\delta_{dw}(\mathbf{x})$ no somatório escolhe somente as paredes de domínio e $\theta(\mathbf{x})$ é o ângulo entre o vetor diretor em \mathbf{x} e a direção média dos vetores diretores da rede. Se esse ângulo é zero ou π para todos sítios nas paredes, o sistema está alinhado à direção global e $q_o = 1$. Porém, se a direção local é aleatória, o cosseno varia arbitrariamente entre -1 e 1 e $q_o \rightarrow 0$.

A quantidade descrita acima é usada em cristais líquidos bidimensionais para definir a ordem nemática, com a direção do vetor diretor sendo análoga ao eixo molecular. Assim como em cristais líquidos [3], a orientação global não é necessariamente conhecida e para calcular q_o é preciso tomar um parâmetro de ordem tensorial Q definido como:

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N_{dw}} \sum_{\mathbf{x}} \delta_{dw}(\mathbf{x}) [2n_{\alpha}(i)n_{\beta}(i) - \delta_{\alpha\beta}] \quad (4.7)$$

onde $\alpha, \beta = 1, 2$ são as componentes cartesianas. No limite termodinâmico seus autovalores são exatamente $\pm q_o$. Quando levado em conta o tamanho finito, seus autovalores se comportam como $\pm q_o + O(1/\sqrt{N_{dw}})$ e na fase isotrópica [3] espera-se um valor positivo pequeno para q_o . Sendo assim, a forma do parâmetro de ordem nemático (ou orientacional) utilizada é o autovalor positivo de (4.7):

$$q_o = \sqrt{Q_{11}^2 + Q_{12}^2} \quad (4.8)$$

Esse parâmetro de ordem se mostrou robusto frente às diferentes orientações das faixas, desde que o tamanho do sistema seja suficiente para conter um número mínimo de paredes de domínio.

4.2 Parâmetro de Ordem Translacional

A ordem translacional é medida aqui também através de uma analogia com cristais líquidos e cristais em geral. Nesses casos o parâmetro de ordem translacional é definido como [29]:

$$\rho(\mathbf{G}) = \frac{1}{N} \sum_i \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_i) \quad (4.9)$$

onde \mathbf{G} é um vetor da rede recíproca e \mathbf{r}_i é a posição do átomo i . Se todos os N átomos estão separados por uma distância $\lambda = 2\pi/G$ na direção de \mathbf{G} , $\rho_{\mathbf{G}} = 1$. Se não existe

nenhuma periodicidade associada a esse vetor de onda, $\rho_{\mathbf{G}} \rightarrow 0$.

Como a definição (4.9) depende fortemente da origem das coordenadas, define-se um parâmetro de ordem translacional que independe da escolha da fase:

$$\rho(\mathbf{G}) = \frac{1}{N} \left| \sum_i e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_i} \right| \quad (4.10)$$

Para fazer a analogia com o sistema de faixas, a posição da parede de domínio é tomada como a de um sítio preenchido por um átomo e o vetor de onda \mathbf{G} relevante é o \mathbf{k}_m , correspondente ao pico do fator de estrutura:

$$S(\mathbf{k}) = |\phi(\mathbf{k})|^2 \quad (4.11)$$

onde \mathbf{k}_m corresponde ao vetor de onda da modulação de uma configuração de faixas de largura $h = \pi/|\mathbf{k}_m|$ com orientação preferencial paralela à \mathbf{k}_m .

Como o comprimento de onda correspondente à \mathbf{k}_m é o de duas faixas ($2h$), poucos pontos entram na soma em (4.10) para calcular o parâmetro de ordem translacional. Para aumentar a estatística de pontos nas paredes de domínio, o parâmetro de ordem é calculado duas vezes com $\mathbf{G} = 2\mathbf{k}_m$ para contar com pontos da parede de domínio de ambas as faixas.

Na primeira vez as paredes escolhidas, denominadas aqui por "paredes 1", são as paredes à esquerda e/ou acima da faixa a qual pertencem. Na segunda vez as paredes escolhidas, "paredes 2", estão à direita e/ou abaixo da faixa a qual pertencem. Essas paredes estão ilustradas para um caso de faixas verticais na figura abaixo (fig. 4.2):

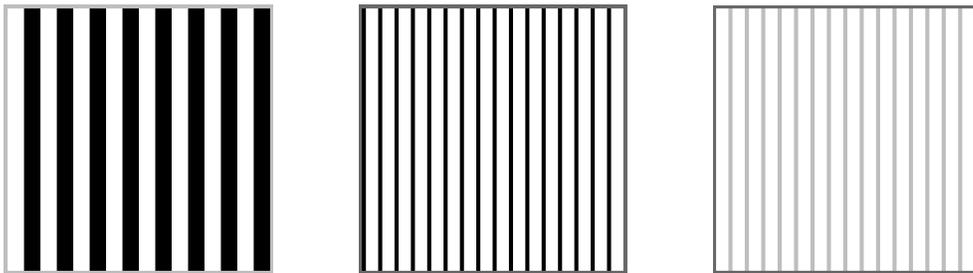


Figura 4.2: à esquerda, uma configuração de faixas puras, onde os campos na faixa preta assumem valores negativos. As duas figuras à direita são os sítios das paredes 1 (preto) e os sítios das paredes 2 (cinza), que são as diferentes paredes de domínios usadas independentemente para estimar q_t .

O valor do parâmetro de ordem resultante é a média desses dois:

$$q_t \equiv \frac{1}{2N'_1} \left| \sum_{i_1} e^{i2\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{x}} \right| + \frac{1}{2N'_2} \left| \sum_{i_2} e^{i2\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{x}} \right| \quad (4.12)$$

com $N'_{1,2}$ sendo o número de sítios das paredes 1 e 2, respectivamente.

Essa definição do parâmetro de ordem translacional não é a definição usual para sistemas de faixas. Geralmente a ordem translacional é definida em termos de um campo contínuo de deslocamento $u(\mathbf{x})$ que corresponde ao quanto a borda de uma faixa está deslocada em relação à posição do estado fundamental [11]. Porém, essa definição pode ser muito complicada de implementar em um espaço discreto.

Entretanto, devido a arbitrariedade em escolher um "lado" da faixa para que o sistema tenha uma periodicidade bem definida, em alguns casos de faixas inclinadas formadas por "degraus" no espaço, como na figura (fig. 4.3), as paredes de domínio não ficaram bem definidas, prejudicando a precisão do parâmetro de ordem. No caso em que as faixas são verticais ou horizontais, esse problema não pareceu ser muito relevante.

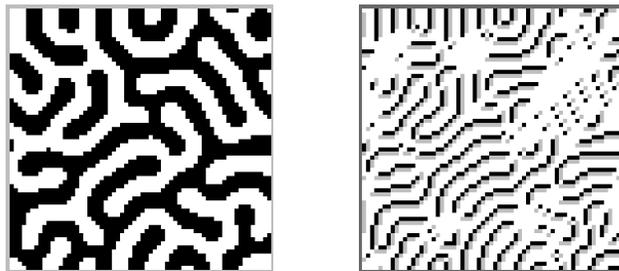


Figura 4.3: à esquerda, uma configuração de faixas em um estado sem ordens orientacional e posicional. A direita, as paredes 1 (preto) e 2 (cinza) para esse estado.

4.3 Resultados

As simulações foram feitas com sistemas de faixa de largura $h = 2, 3$ e 4 , correspondendo aos valores de $\delta = 1, 2$ e 3 , respectivamente. Esses valores foram escolhidos de acordo com as energias do sistema para as três larguras de faixas a temperatura zero, graficadas para diferentes δ s na figura (fig. 4.4).

A escolha da constante de discretização da rede foi feita analisando o espectro de flutuações na figura (fig. 4.5) e determinando um valor de r_0 tal que $A(k_m) < 0$. Os valores escolhidos foram de $r_0 = -5$ para as faixas 2 e 3, e de $r_0 = -3$ para faixa 4. Essa diferença implica em escalas diferentes de tempo, energia e espaço entre essas

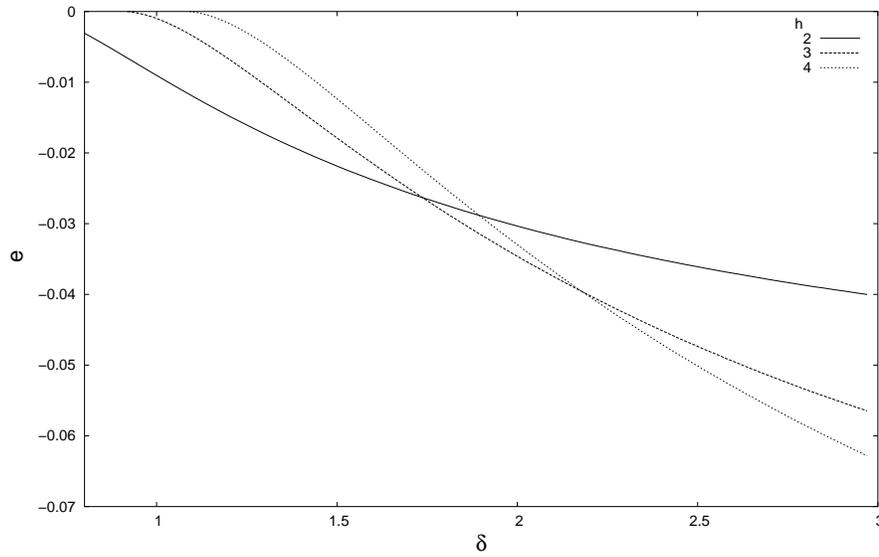


Figura 4.4: energia por unidade de área para configurações de faixa de diferente largura, calculada com $L = 192$ e $a = \sqrt{5}$.

simulações. Entretanto, as transformações das eqs. (3.20) aplicadas nas amostras das simulações tornam possível um comparação entre esses resultados, como será ressaltado mais adiante.

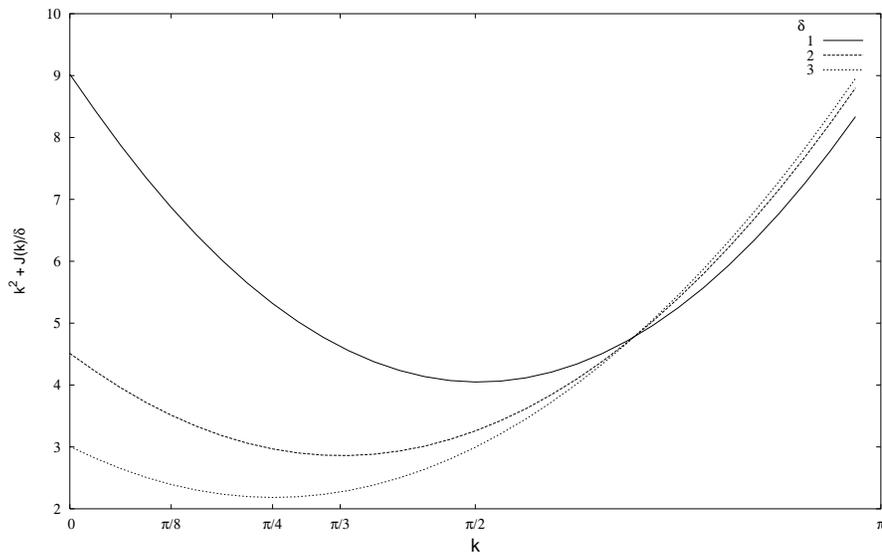


Figura 4.5: espectro de flutuações, sem o r_0 , para os diferentes deltas. $a = 1$.

As soluções de faixas para os parâmetros usados nas simulações podem ser visualizadas em uma seção transversal ao longo da direção de modulação na figura (fig. 4.6).

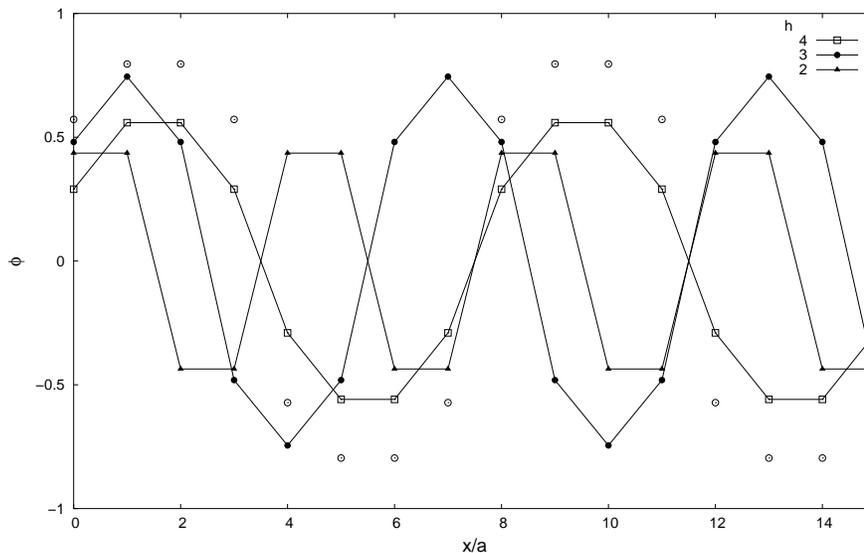


Figura 4.6: as diferentes soluções da equação de Langevin adimensional (3.34) correspondentes ao estado fundamental, obtidas da seção transversal da configuração estacionária a temperatura zero após a inicialização em uma configuração cosseno. Para as faixas 2 e 3, $a = \sqrt{5}$ e para a faixa 4, $a = \sqrt{3}$. Para fins de comparação, a solução de faixa 4 com os mesmos parâmetros utilizados nas faixas 2 e 3 é graficada em pontos sem linha.

Assim, na equação de Langevin com parâmetros adimensionais (3.34), a constante de rede para experiências com faixas 2 e 3 é $a = \sqrt{5}$, e com faixa 4, $a = \sqrt{3}$. O passo de tempo escolhido foi de 0.5 em que, para todas experiências, era bem menor que o passo de tempo que tornava a atualização instável. O método de integração se mostrou estável na janela de temperaturas de interesse.

As experiências consistem primeiramente em equilibrar o sistema na fase isotrópica a partir de uma condição inicial paramagnética, ou no estado fundamental de faixas, e resfriar ou aquecer o sistema a uma taxa lenta, que é determinada pela maior taxa de resfriamento dT_m onde o sistema consegue atingir o estado fundamental. Essa taxa é estipulada por medidas em uma amostra e o valor dela dependente do tamanho e de δ . Próximo às transições de fase, a taxa utilizada é uma ordem de grandeza menor do que dT_m .

Todas as medidas apresentadas aqui foram tomadas como médias sob um conjunto independente de amostras. A experiência foi repetida para cada amostra, onde todas foram preparadas sob condições iniciais equivalentes, mas cada uma com uma história térmica independente, isto é, sob efeito de diferentes realizações do ruído térmico. Para as faixas 2 e 3 foram usadas 100 amostras. Para a faixa 4, 200 amostras foram usadas.

Os tamanhos lineares dos sistemas usados nas simulações foram tais que contivessem o mesmo número de 16 faixas, portanto de $L = 32, 48$ e 64 .

Faixa 2

Ao contrário dos outros casos a seguir, para $\delta = 1$ é usada uma taxa de variação da temperatura muito menor do que a taxa mínima dT_m , portanto as curvas de aquecimento e resfriamento se sobrepõem e o sistema está muito próximo ao equilíbrio. Sendo assim, é apresentado o resfriamento iniciado na temperatura $T = 0.1$ com a taxa $dT = 10^{-8}$ até uma temperatura abaixo da transição, $T = 0.05$, abaixo da qual as medidas foram obtidas no aquecimento.

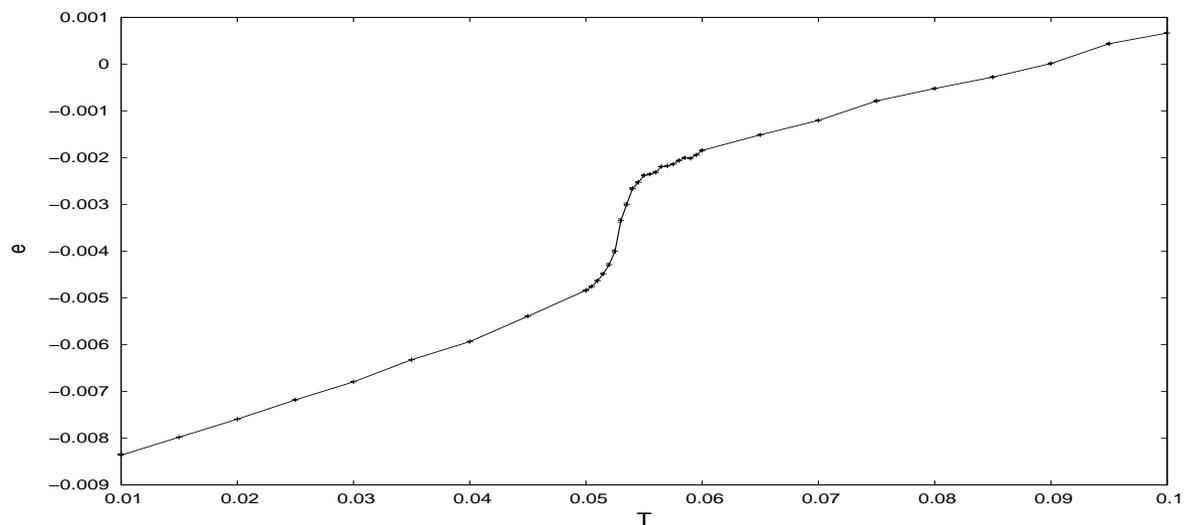


Figura 4.7: energia por unidade de área para $L = 32$ e $\delta = 1$

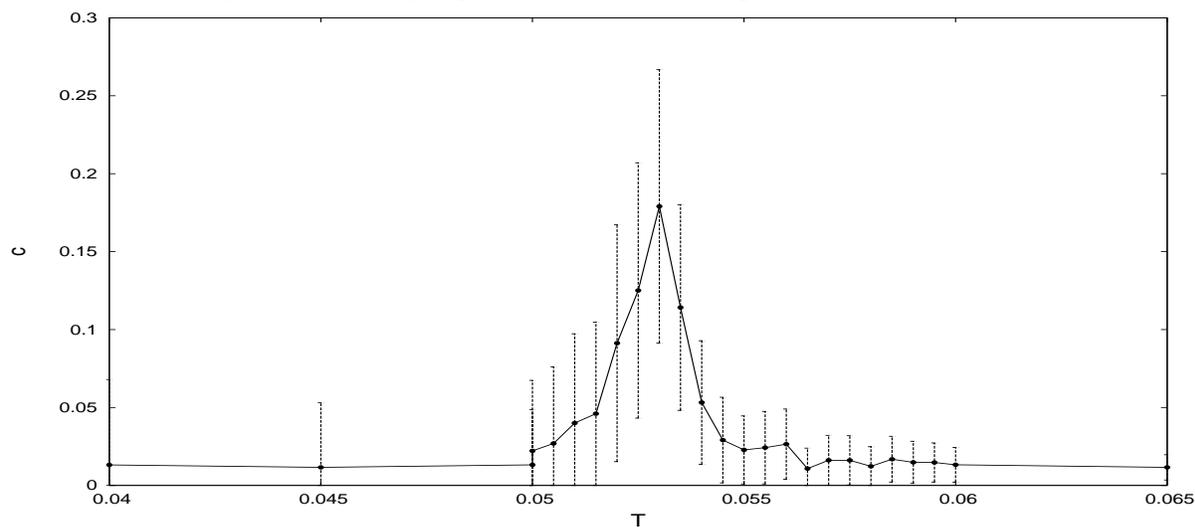


Figura 4.8: calor específico por unidade de área para $L = 32$ e $\delta = 1$.

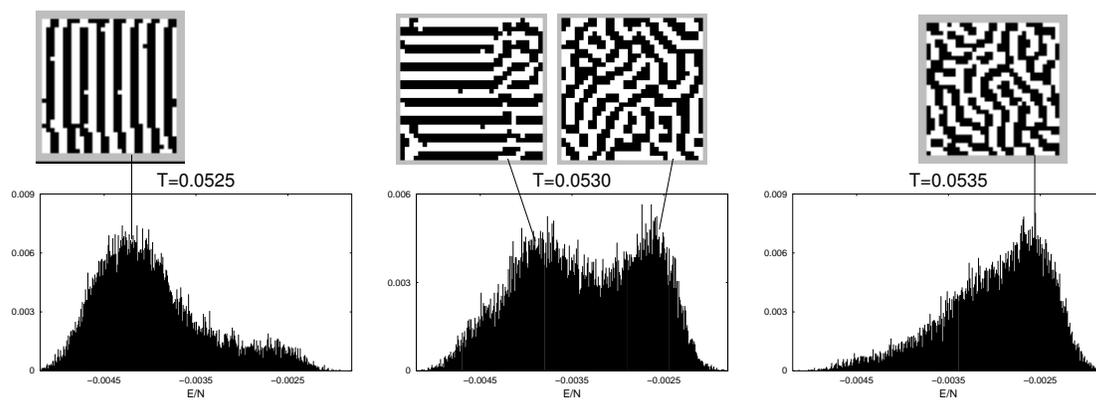


Figura 4.9: histogramas da energia para temperaturas em torno da transição com configurações típicas dos máximos

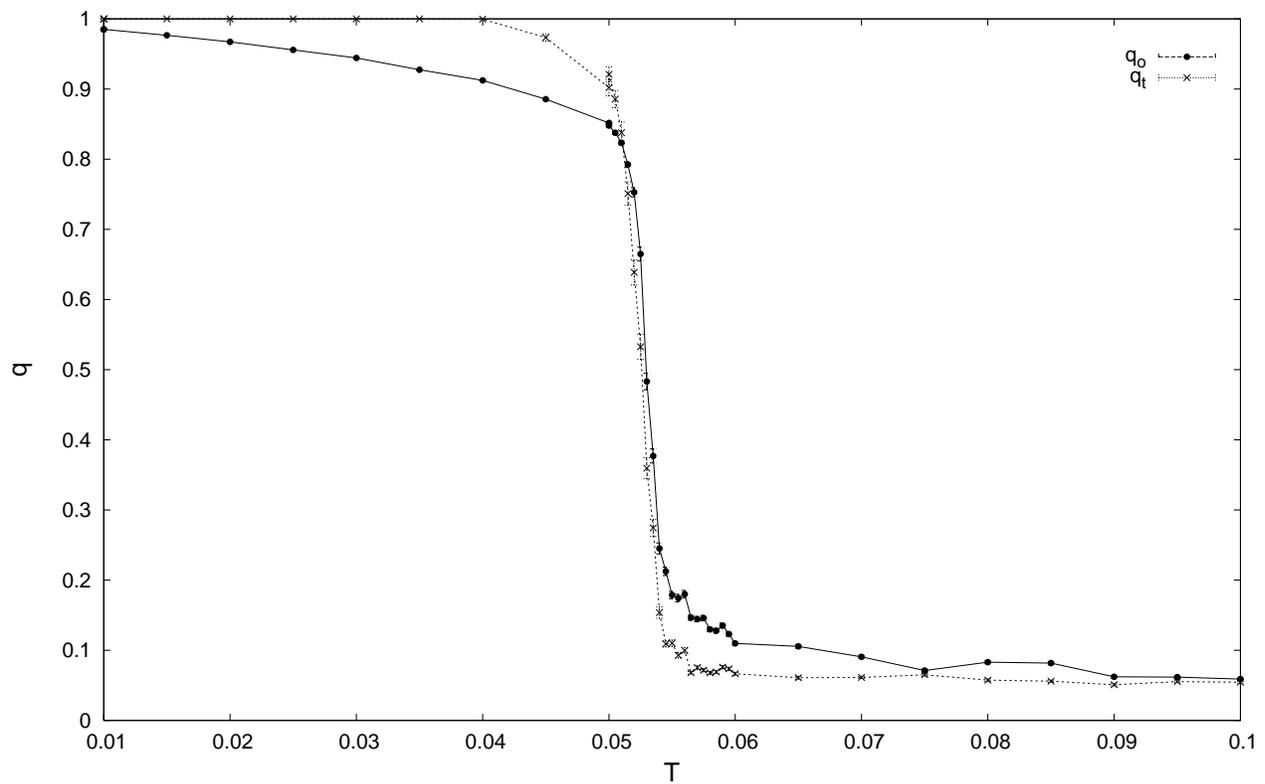


Figura 4.10: parâmetros de ordem para $L = 32$ e $\delta = 1$

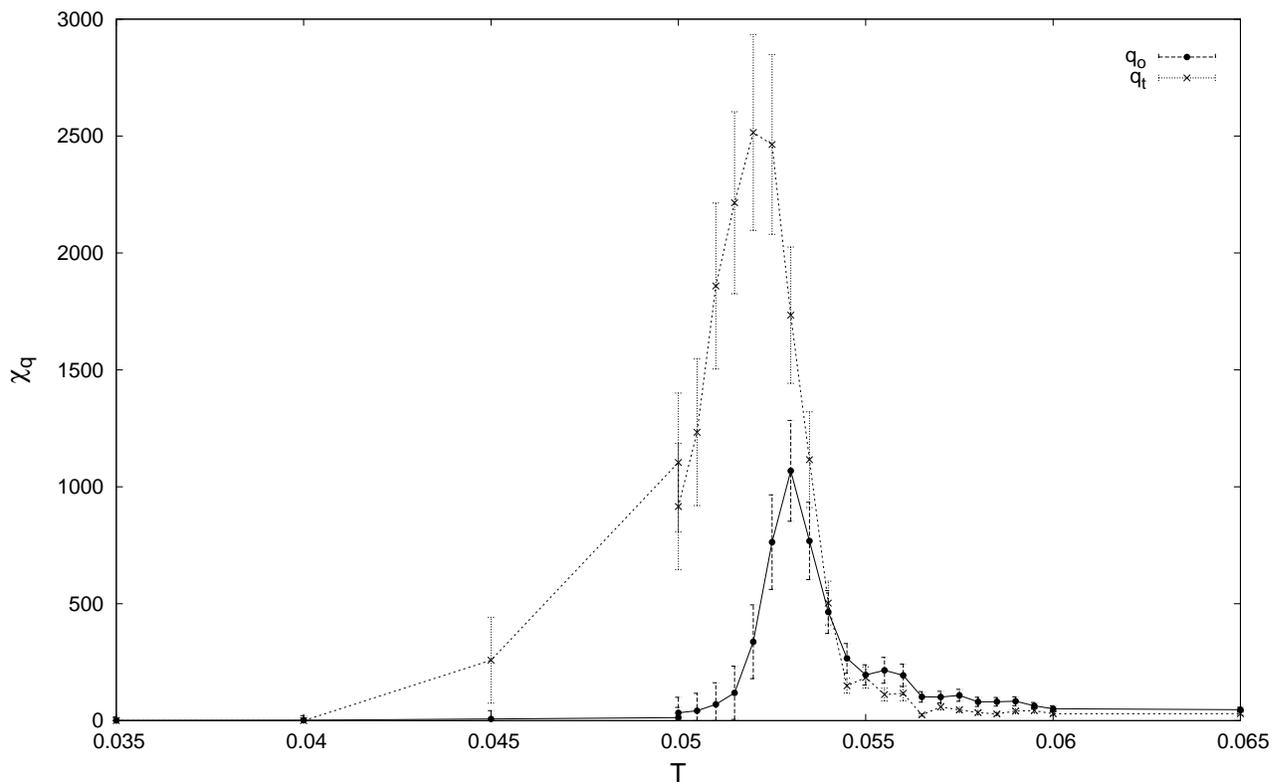


Figura 4.11: susceptibilidades dos parâmetros de ordem para $L = 32$ e $\delta = 1$

As curvas de energia (fig. 4.7) e do calor específico (fig. 4.8) mostram uma transição abrupta em $T = 0.0530$, que recebe fortes indícios de uma transição de primeira ordem fraca na análise dos histogramas de energia em torno da transição (fig. 4.9), onde um duplo pico sobre a transição aponta para uma coexistência entre as fases de baixa e alta temperatura. Essa estrutura do histograma de energia é característica de uma transição de primeira ordem [18].

Os parâmetros de ordem e suas susceptibilidades também assinalam, com muito mais ênfase, uma transição de primeira ordem.

Faixa 3

Para $\delta = 2$, a taxa de variação da temperatura utilizada foi a $dT_m = 10^{-7}$ e o resfriamento foi iniciado na temperatura $T = 0.2$. Porém, a diferença entre o aquecimento e o resfriamento com essa taxa fica evidente na histerese próxima a transição em $T \approx 0.11$ e pode ser melhor visualizada na ampliação das curvas de energia em torno da transição (fig. 4.14) ou no gráfico do parâmetro de ordem nemático (fig. 4.17). Esse efeito indica a presença de estados metaestáveis das fases de baixa e alta temperatura.

Para obter medidas mais próximas ao equilíbrio, foram utilizadas as configurações obtidas no aquecimento em $T = 0.10$ e no resfriamento em $T = 0.12$ como condições iniciais para continuar, após um transiente de 10^4 passos de tempo, a experiência de aquecimento ou de resfriamento a uma taxa menor, $dT = 10^{-8}$. As curvas obtidas, a menos que apontado o contrário, são graficadas com as curvas de $dT = 10^{-7}$.

Uma diferença ao caso anterior de faixa 2 é a aparência suave das curvas de energia (fig. 4.13), mesmo próximo a transição. Nessa região, entre $T = 0.10$ e 0.12 ela sofre uma mudança de comportamento muito pequena. O calor específico (fig. 4.15) parece ressaltar esse caráter da energia, já que uma anomalia próxima a transição em $T \approx 0.109$ quase não se faz distingüível frente aos demais pontos. Cabe ressaltar que na figura (fig. 4.15) do calor específico as barras de erro são omitidas por serem muito maiores que a janela de valores no gráfico (são da ordem de 0.1).

Um histograma da energia com algumas configurações características são mostrados para a temperatura $T = 0.109$ na figura (fig. 4.16) e confirma a forte degenerescência da energia nessa região, que parece não distinguir uma transição de fase.

Entretanto, se observa justamente o oposto no comportamento dos parâmetros de ordem. O parâmetro de ordem nemático na figura (fig. 4.17) indica que a passagem entre $T = 0.10$ e 0.12 (onde a energia parece ter uma declividade) corresponde a uma transição de ordem orientacional. O pico na sua susceptibilidade (fig. 4.19) aponta uma transição em torno de $T = 0.113$, onde os outros picos menores indicam a presença de estados

metaestáveis.

A mudança na inclinação do parâmetro de ordem nemático a temperaturas mais baixas $T \approx 0.05$ pode ser conectada a mudança brusca no parâmetro de ordem translacional nessa região (fig. 4.18), abaixo da qual as paredes das faixas estão perfeitamente alinhadas e $q_t = 1$. Essa passagem é bem capturada pela definição da equação (4.12) para q_t , como se nota pelo pico para essa transição na sua susceptibilidade (fig. 4.20).

Pela mesma definição, não se pode garantir a natureza da fase intermediária que se distingue da de alta temperatura no parâmetro de ordem q_t , que apresenta ali um valor intermediário, e de sua susceptibilidade χ_{q_t} , que tem um pico menor e mais largo na passagem para fase líquida.

Porém, visualizando algumas configurações para diferentes temperaturas na figura (fig. 4.12) se pode afirmar que sinuosidades nas paredes das faixas são responsáveis pela queda abrupta de q_t .

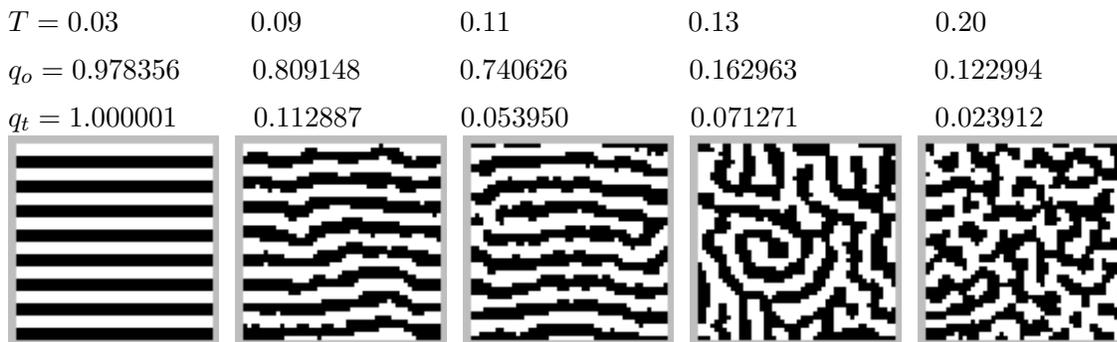


Figura 4.12: configurações de duas amostras de tamanho $L = 48$ para $\delta = 2$ com suas respectivas temperaturas T e parâmetros de ordem q_o e q_t assinalados acima. Uma amostra segue a experiência de aquecimento (nas configurações de temperaturas até 0.11) e a outra um resfriamento (nas configurações de temperaturas 0.13 e 0.20).

Pode-se supor que o platô em q_t e a mudança da inclinação de q_o entre a fase de faixas perfeitas e a fase isotrópica seja uma fase com ordem orientacional e sem ordem posicional. As configurações na (fig. 4.12), embora não se possa garantir que sejam configurações típicas ou que estejam em equilíbrio, elas sugerem que essa fase intermediária deva suportar flutuações como sinuosidades ($T = 0.09$) e pares dislocações ($T = 0.11$).

Entretanto, se as sinuosidades destroem efetivamente a ordem posicional isso só pode ser confirmado medindo funções de correlação espaciais dos parâmetros de ordem que caracterizem efetivamente o grau de ordem do sistema, juntamente com medidas mais cuidadosas de equilíbrio que capturem, tanto no calor específico quanto nas flutuações do parâmetro de ordem nemático, a presença de duas fases termodinâmicas de equilíbrio.

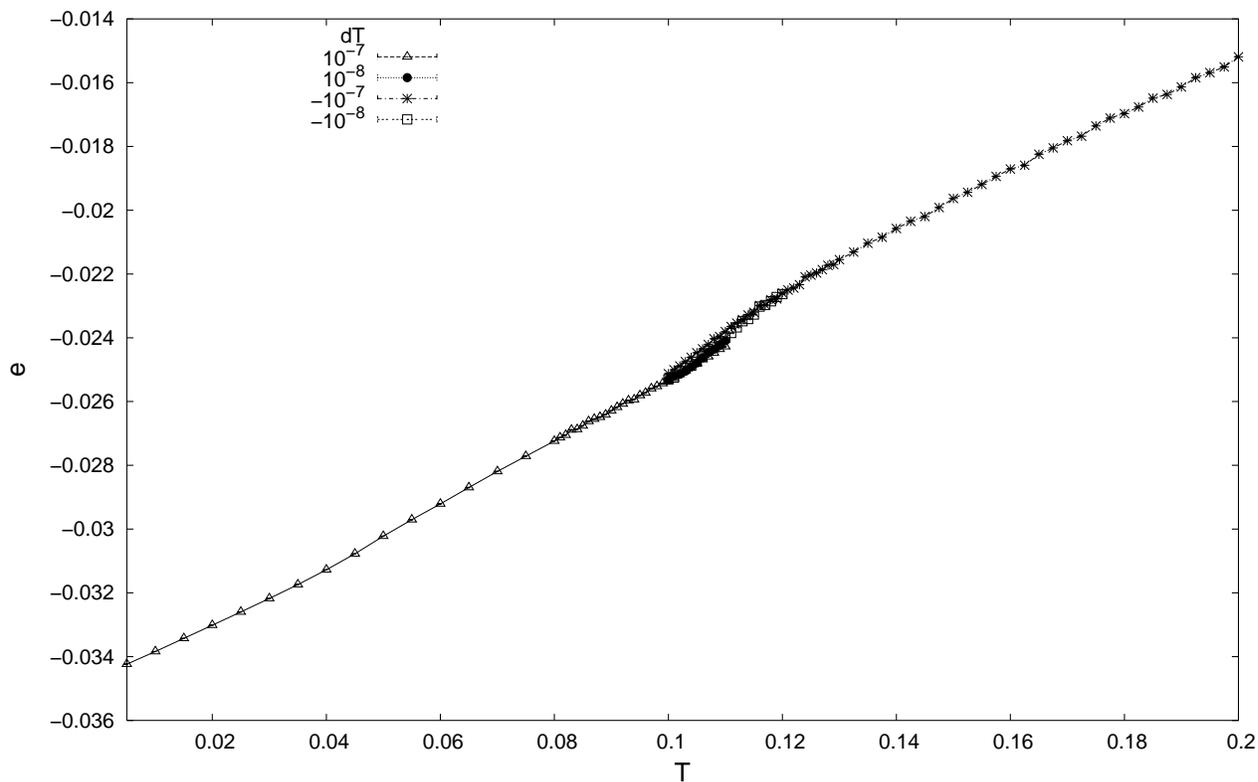


Figura 4.13: energia por unidade de área para $L = 48$ e $\delta = 2$

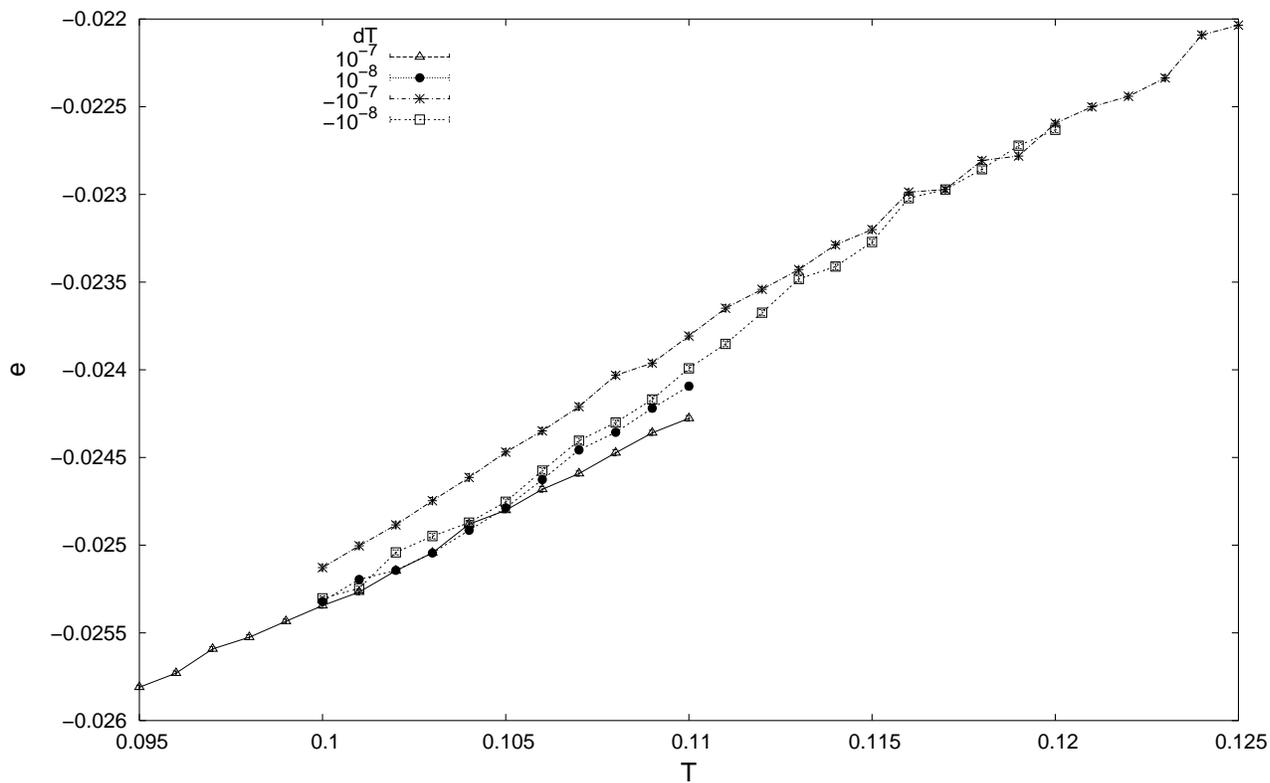


Figura 4.14: uma ampliação da figura acima

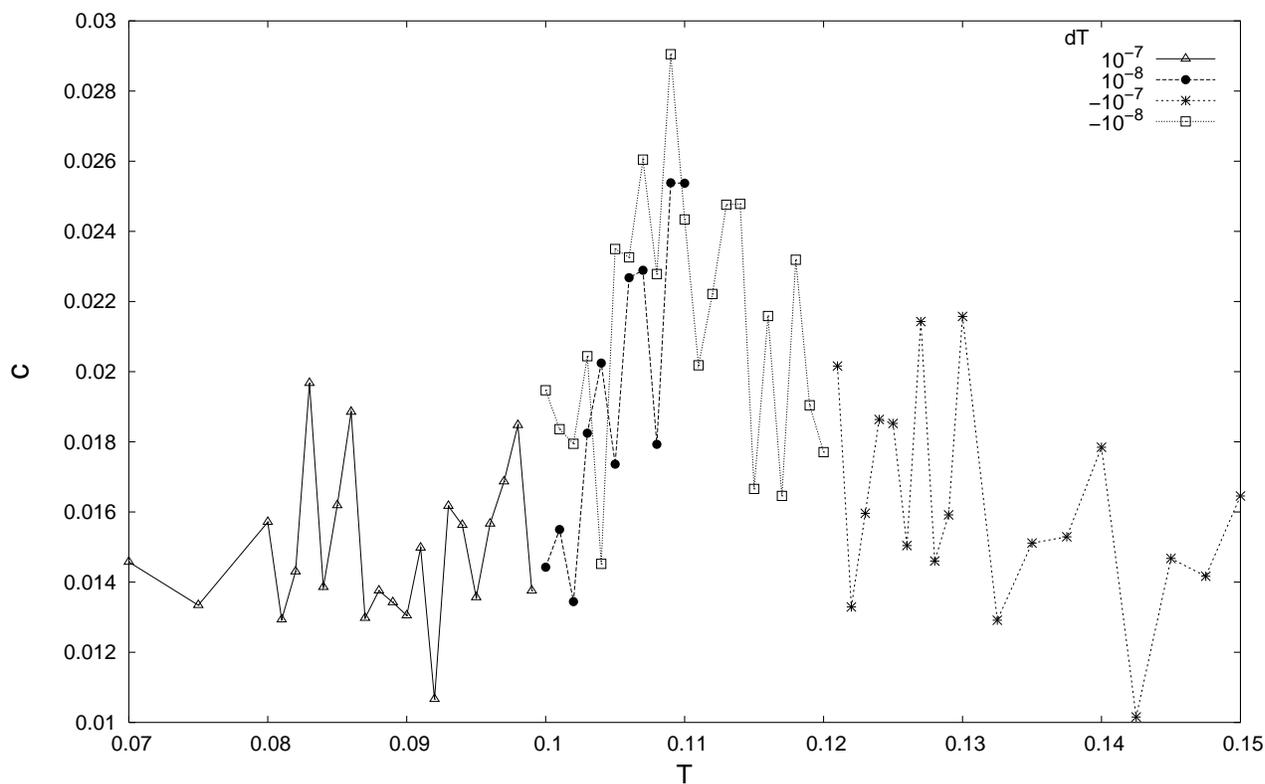


Figura 4.15: calor específico por unidade de área para $L = 48$ e $\delta = 2$. As curvas para taxas $dT = 10^{-7}$ na região próxima a transição e as barras de erro foram omitidas por uma questão de clareza.

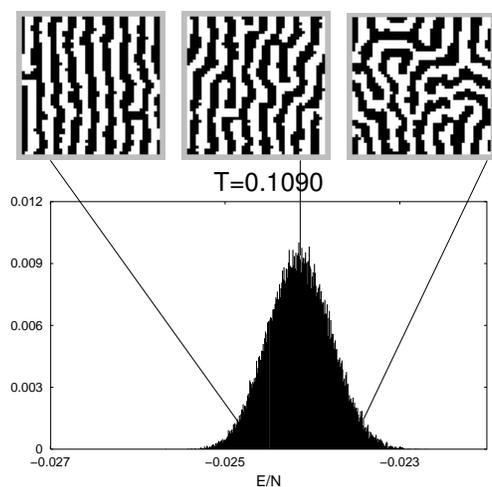


Figura 4.16: histograma da energia na temperatura correspondente ao maior valor do calor específico com algumas configurações características

Figura 4.17: parâmetro de ordem nemático para $L = 48$ e $\delta = 2$

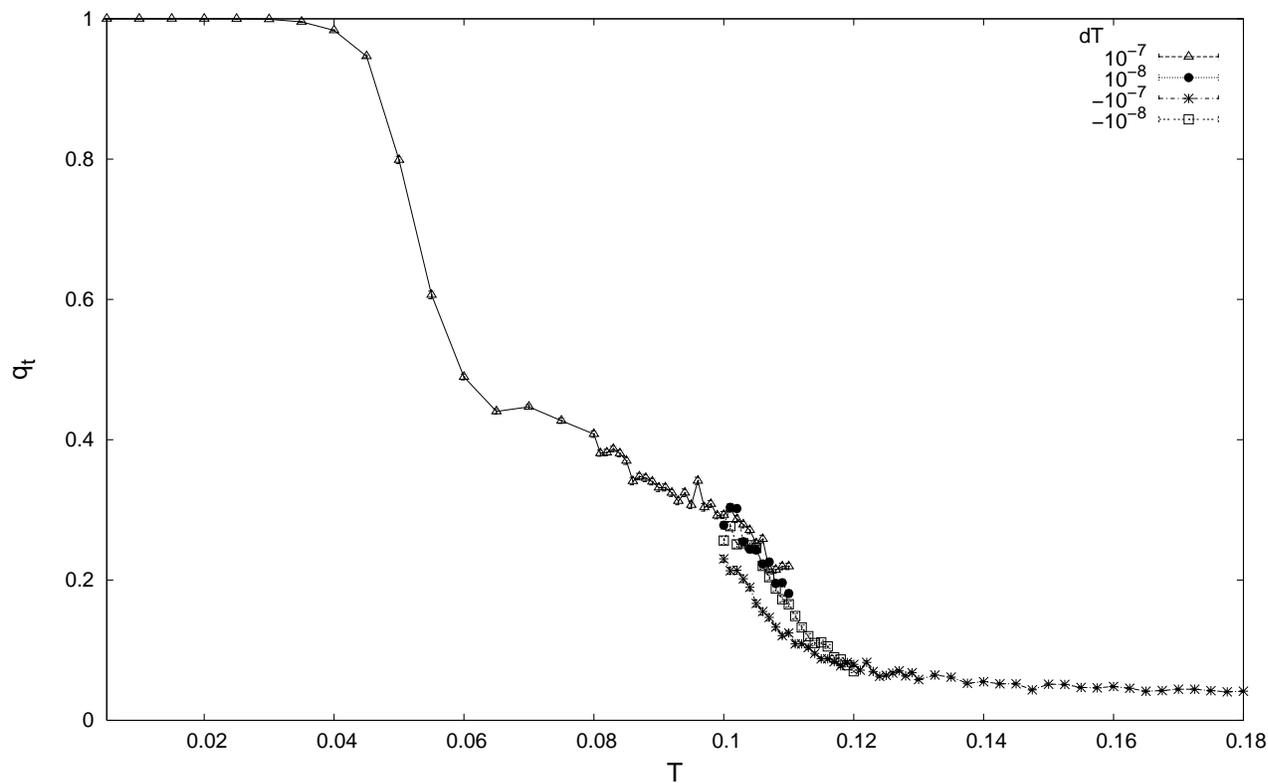
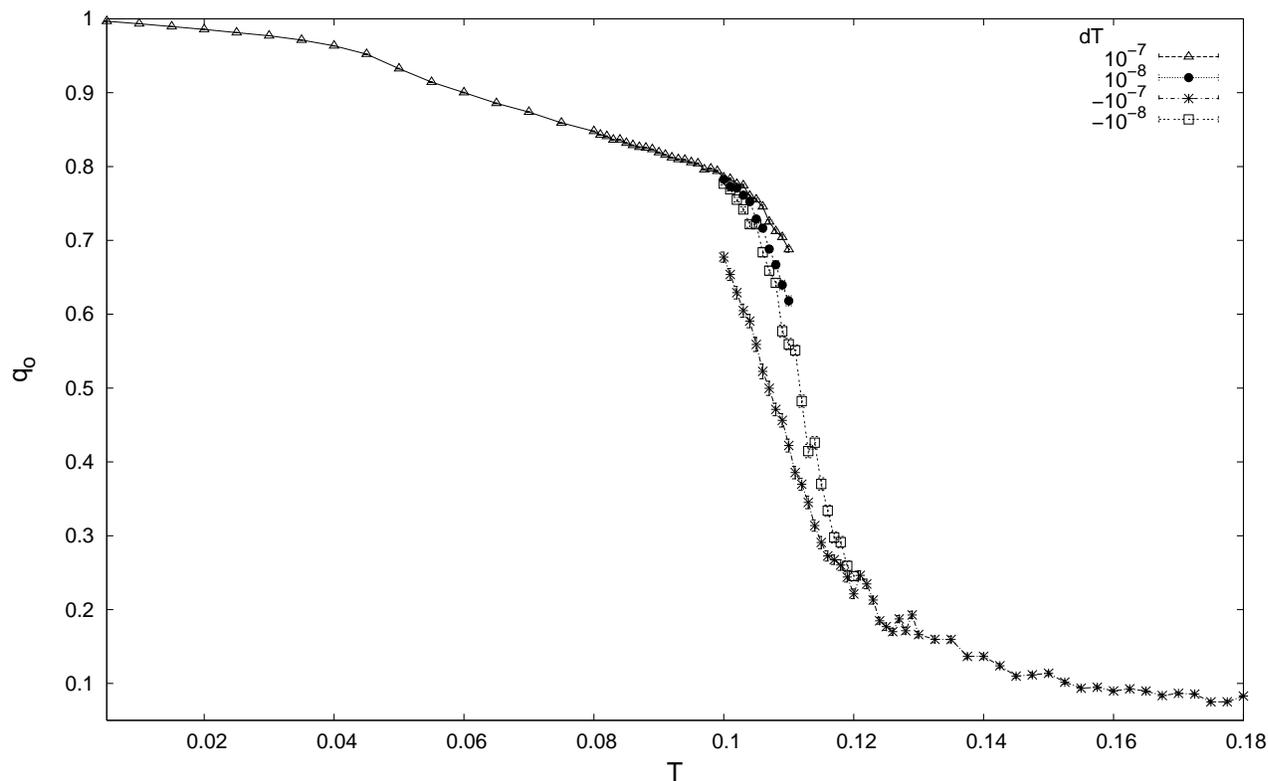


Figura 4.18: parâmetro de ordem translacional para $L = 48$ e $\delta = 2$

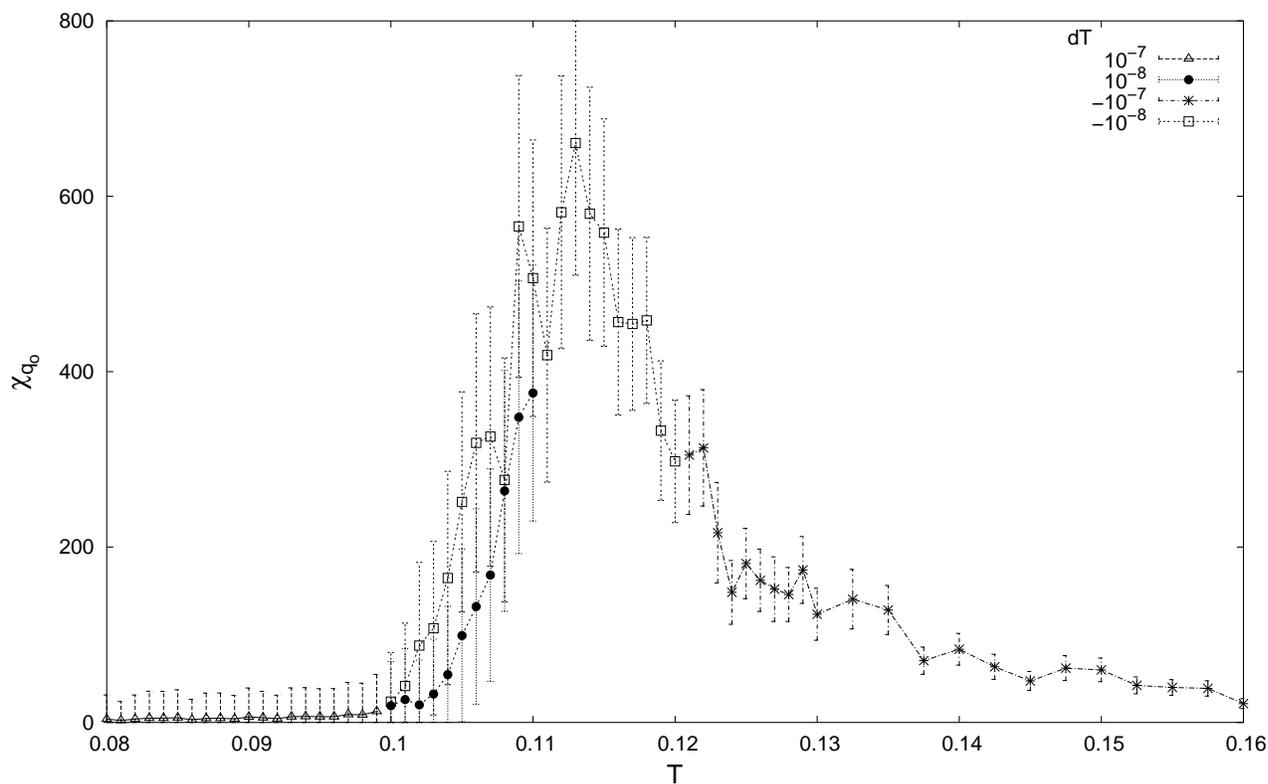


Figura 4.19: susceptibilidade do parâmetro de ordem nemático para $L = 48$ e $\delta = 2$. Por uma questão de clareza, dados das taxas $dT = 10^{-7}$ foram omitidos na região onde se têm resultados de $dT = 10^{-8}$.

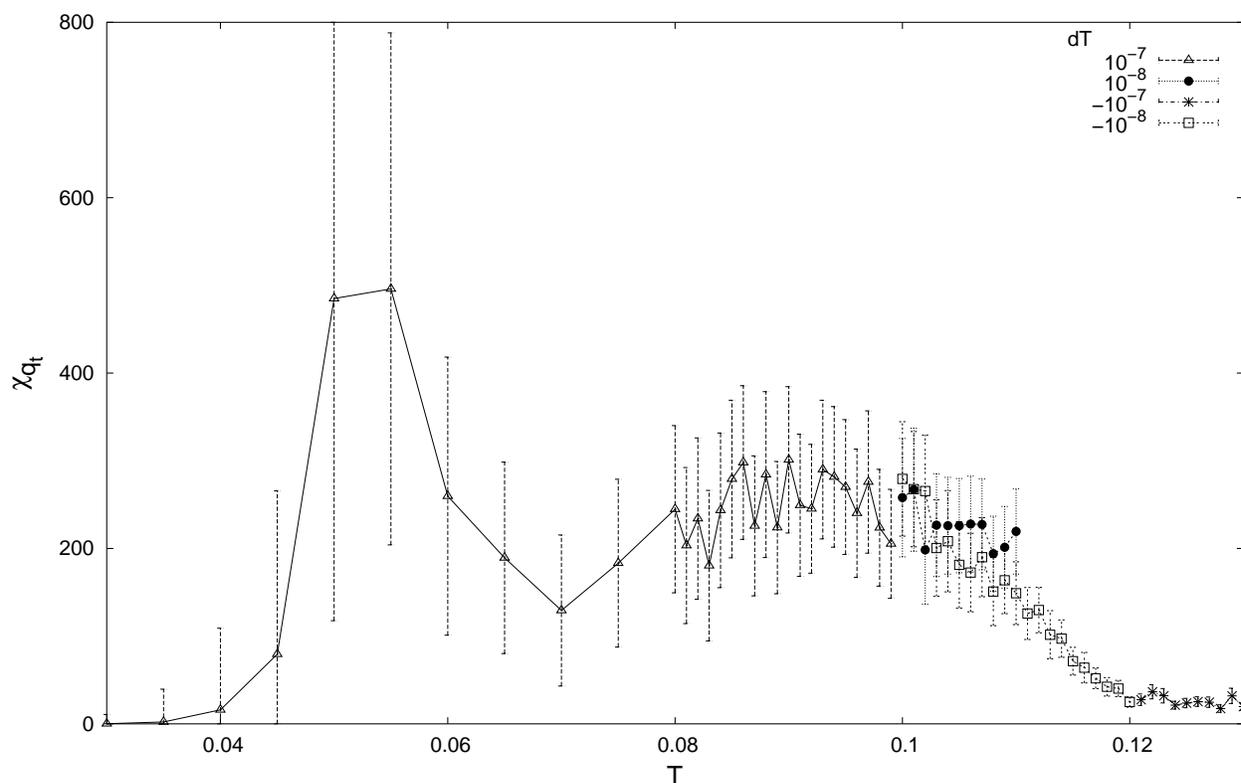


Figura 4.20: susceptibilidade do parâmetro de ordem translacional para $L = 48$ e $\delta = 2$.

Faixa 4

Os resfriamentos foram iniciados em $T = 0.1$ e todas as medidas entre as temperaturas 0.3 e 0.7 foram em taxas $dT = 10^{-8}$. Como todas as medidas para essa largura de faixa foram feitas tomando $a = \sqrt{3}$, e não $\sqrt{5}$ como nos casos vistos anteriormente, as escalas de energia, temperatura e de tempo do caso presente estão relacionadas às medidas anteriores através das transformações em (3.20). Essa comparação será feita em detalhes mais adiante. Aqui para a faixa 4, optou-se por não mostrar o calor específico e nem as susceptibilidades do parâmetro de ordem porque se mostraram medidas muito ruidosas e com barras de erro muito grandes (maiores que para faixa 3).

A energia por unidade de área (fig. 4.22), assim como no caso da faixa 3, tem uma declividade suave próximo a transição. Numa ampliação em torno da transição (fig. 4.23), nota-se que as energias abaixo da transição são diferentes para as duas experiências. Essa diferença permanece até temperatura zero, onde ao contrário da região de transição, a energia do aquecimento é a menor.

A razão para essa diferença é que em temperaturas imediatamente abaixo da transição a orientação mais estável das faixas é uma direção inclinada com relação às bordas da rede quadrada. A temperaturas mais baixas, e sobretudo em $T = 0$, a orientação mais favorável é uma paralela a um eixo cartesiano da rede quadrada. A figura (fig. 4.21) mostra uma sequência de configurações para diferentes temperaturas de uma das amostras do aquecimento. Observa-se que a troca de orientação nessa amostra em $T = 0.0450$ é mediada por uma intensa flutuação do tipo fônon na curvatura das faixas e por um par de dislocações. A temperaturas mais altas, as faixas parecem mudar novamente de direção a medida que a ordem orientacional vai se perdendo.

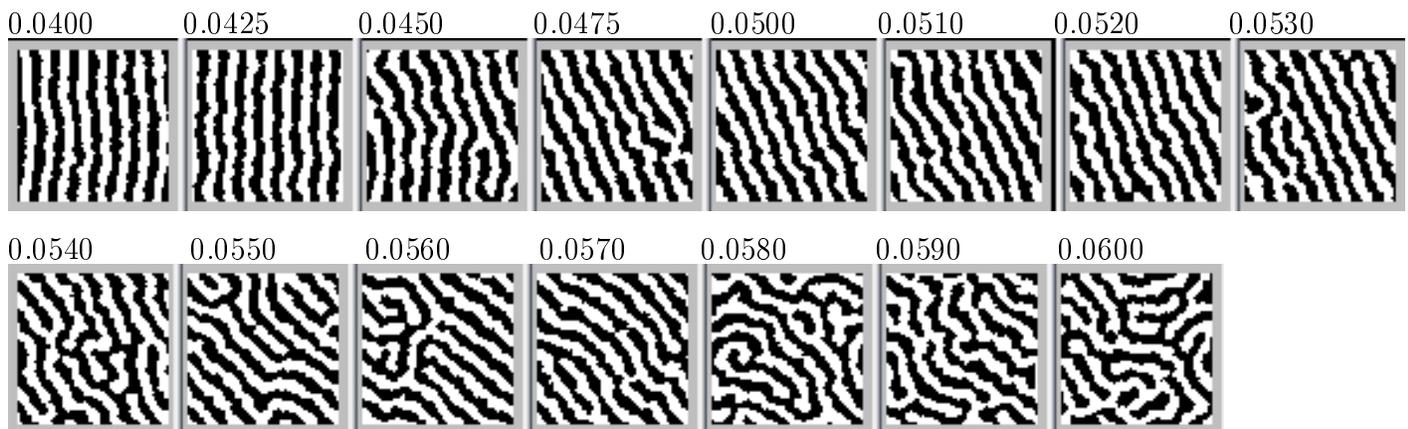


Figura 4.21: configurações do aquecimento de uma amostra a partir do estado fundamental faixa 4, ilustrando a troca de orientação preferencial da faixa. As temperaturas correspondentes estão assinaladas acima da configuração.

Esse cenário não fica muito claro nas medidas do parâmetro de ordem translacional (fig. 4.25) devido a particularidade de sua definição em (4.12). Como faixas inclinadas permanecem metaestáveis até a temperatura zero no resfriamento, o parâmetro de ordem translacional não detecta bem mudanças na estrutura de faixas. Já para o aquecimento partindo do estado de faixas verticais, q_t distingue uma ordem posicional a baixas temperaturas, tal como no caso de faixa 3, porém a temperaturas muito próximas de zero.

O parâmetro de ordem nemático detecta a troca de preferência de orientação durante o aquecimento. Há uma primeira queda em (fig. 4.24) causada provavelmente pelos defeitos criados na passagem para uma orientação inclinada, que só consegue adquirir seu valor de q_o característico (que é aproximadamente o do resfriamento) um pouco antes da transição para a perda de ordem orientacional. Esse efeito de histerese aparece entre $T = 0.04$ e $T = 0.055$, caracterizando o caráter dinâmico do aquecimento e do resfriamento.

É possível que essa troca de orientações seja causada por uma pequena anisotropia direcional de $A(\mathbf{k})$, onde o vetor de onda correspondente ao seu mínimo não está em nenhuma das direções dos eixos cartesianos. Em temperatura zero, a geometria da rede quadrada e as condições de contorno periódicas favorecem as faixas horizontais ou verticais, que possuem uma energia um pouco menor que as faixas inclinadas. A medida que o ruído térmico aumenta, o efeito da rede é menor frente as flutuações das faixas e o sistema pode tomar a orientação que minimiza o $A(\mathbf{k})$.

Esse efeito pode ser contornado favorecendo faixas horizontais ou verticais através de uma anisotropia direcional, determinada por uma discretização espacial sobre uma rede retangular, por exemplo.

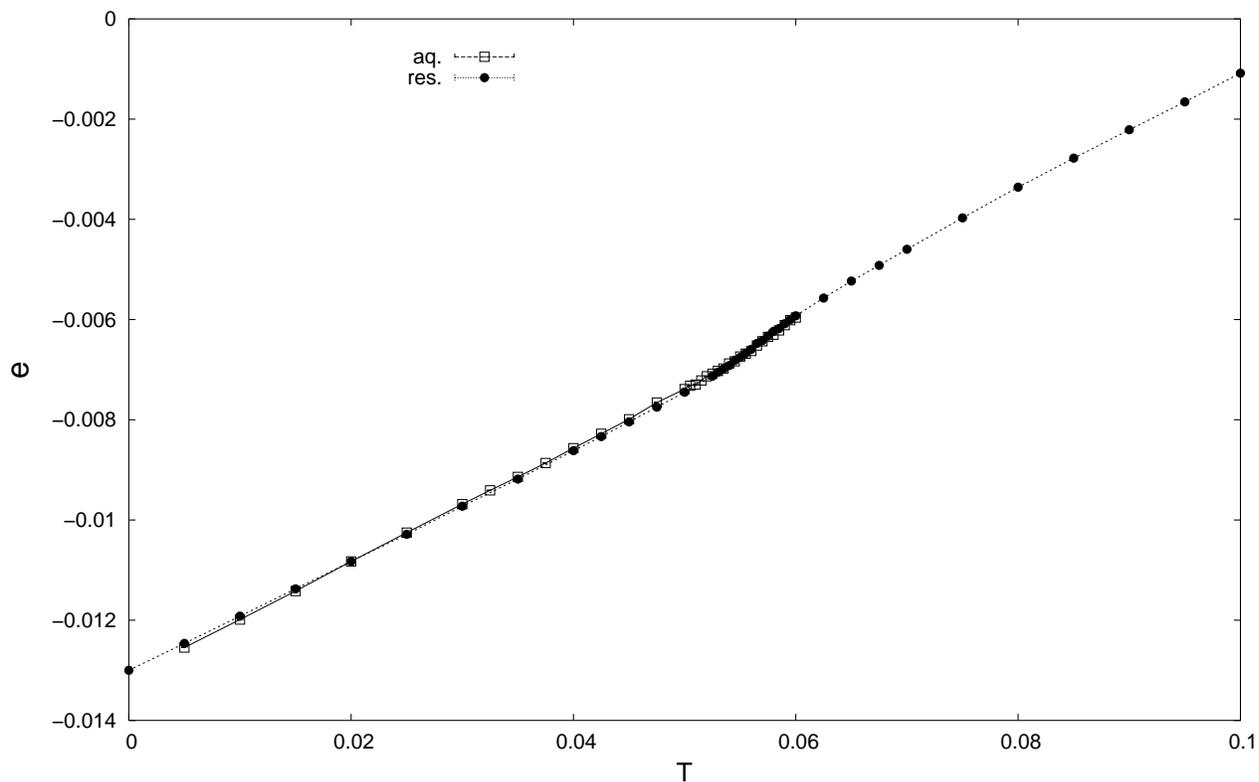


Figura 4.22: energia por unidade de área para $L = 64$ e $\delta = 3$. Nessa figura e nas próximas para faixa 4, o aquecimento é denotado por "aq." e o resfriamento por "res.".

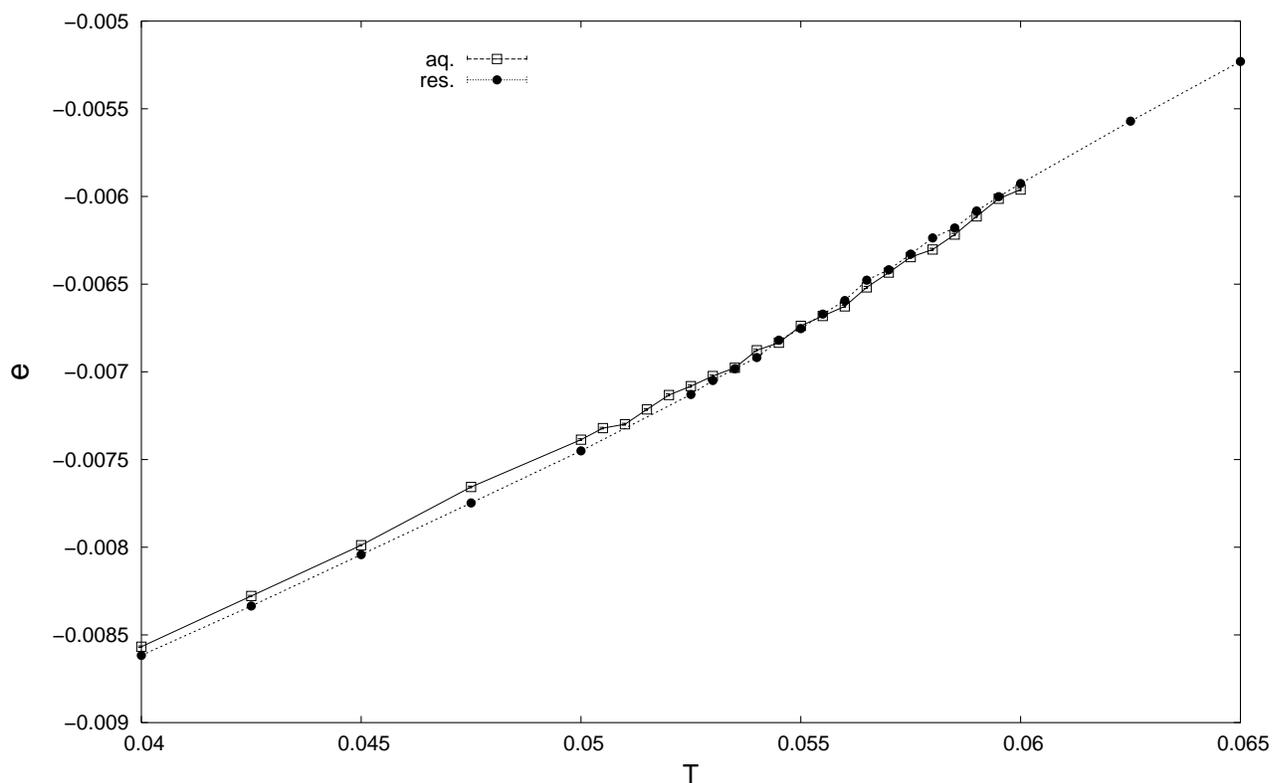


Figura 4.23: uma ampliação da figura acima

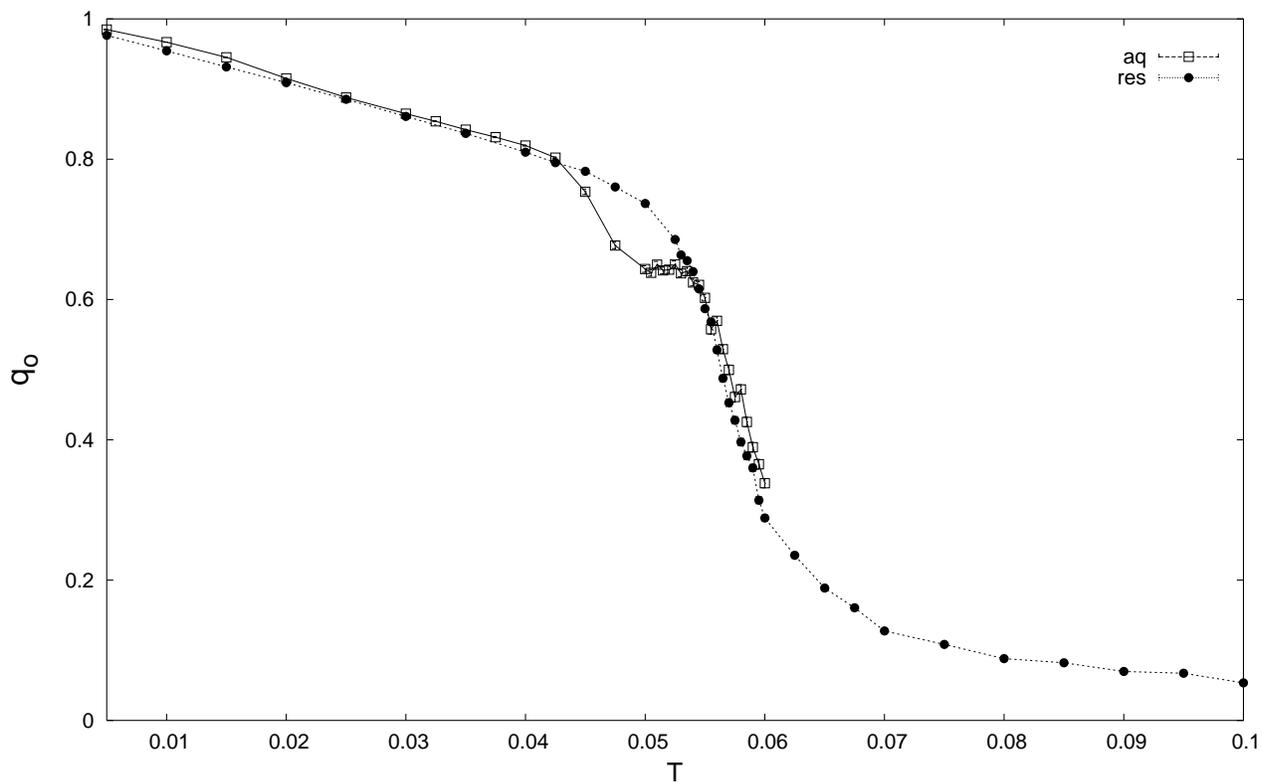


Figura 4.24: parâmetro de ordem nemático para $L = 64$ e $\delta = 3$

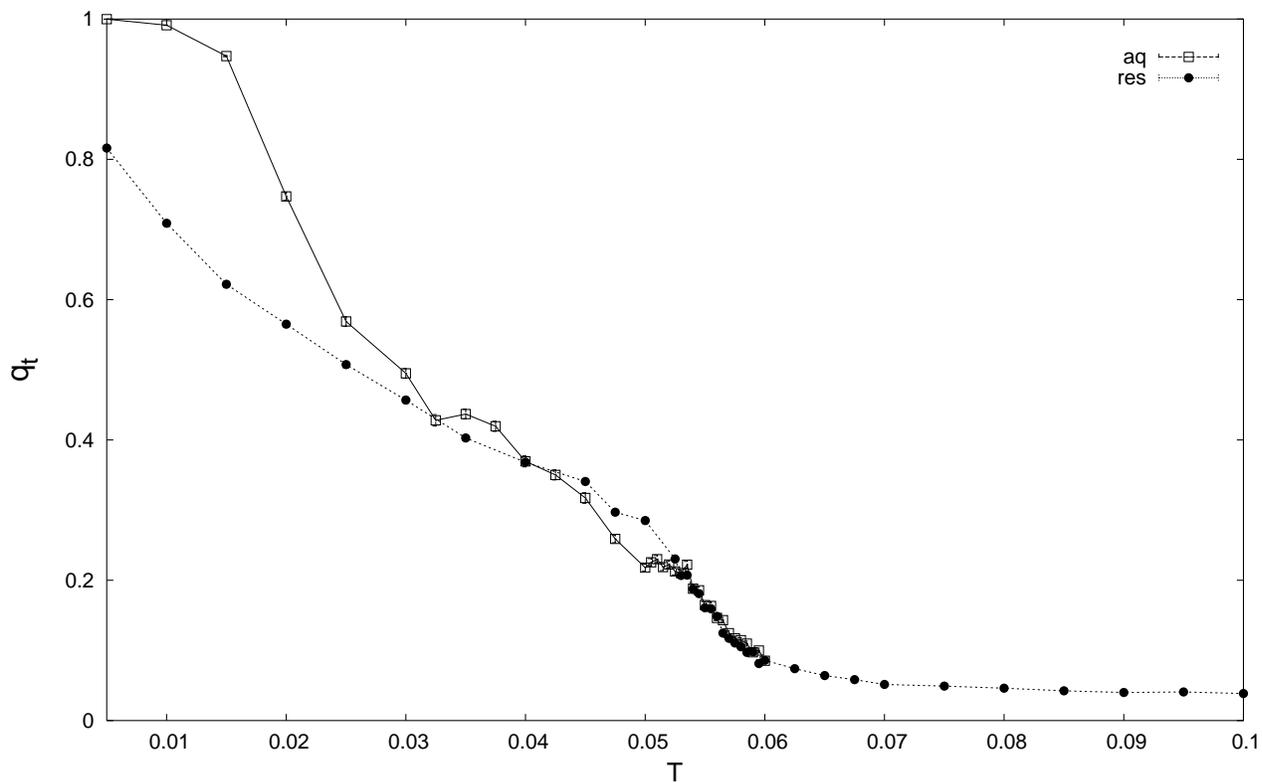


Figura 4.25: parâmetro de ordem translacional para $L = 64$ e $\delta = 3$

Resumo

É possível reescalar as amostras das simulações de faixa 4 através das transformações (3.20) e (3.22) afim de comparar os resultados em uma mesma escala de energia. Cabe ressaltar que essas transformações não levam necessariamente uma configuração típica do sistema original a uma configuração típica equivalente do sistema descrito pelas novas variáveis.

Na figura (fig. 4.26) é possível comparar as energias para as diferentes faixas. Como o intuito dessa figura é fazer uma compilação dos resultados para comparação, a curva de faixa 3 foi graficada usando as medidas que estariam mais próximas do equilíbrio. Assim, a curva é composta das medidas de taxas mais rápidas, exceto entre $T = 0.1$ e 0.12 onde foi graficada a curva de resfriamento a $dT = 10^{-8}$. Para a faixa 4, somente o resfriamento foi graficado. Esses pontos selecionados para graficar a energia também foram usados nas próximas figuras do parâmetro de ordem nemático e sua susceptibilidade.

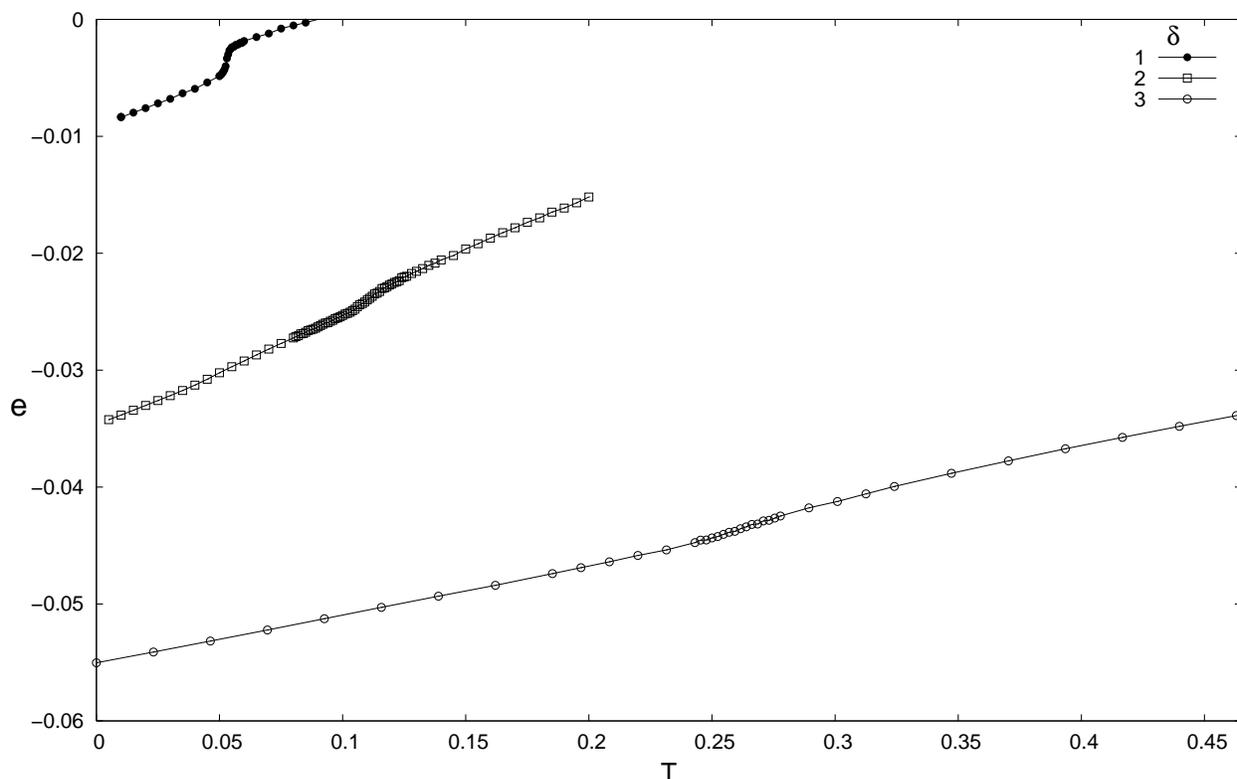


Figura 4.26: energia por unidade de área para os diferentes δ_s .

O que é evidenciado nessa figura é a sensibilidade do sistema frente aos diferentes valores de δ . A medida que a largura das faixas vão aumentando com δ , a energia vai deixando de assinalar uma transição de fases; em comparação à medida de $\delta = 1$ (faixa 2), as outras medidas não só adquirem uma forma contínua, como quase não mudam de

funcionalidade perto ou abaixo da transição.

Uma transição de fases só fica evidente nas medidas dos parâmetros de ordem, e em especial o parâmetro de ordem nemático (fig. 4.28), que está bem definido em todas as janelas de temperaturas exploradas. Assim como no caso da energia, ele passa a assumir um caráter cada vez mais contínuo para as faixas 3 e 4, embora ainda distinga bem os dois tipos de fases (com e sem ordem orientacional). Esse enfraquecimento da transição fica claro observando a susceptibilidade desse parâmetro de ordem para as diferentes faixas (fig. 4.27).

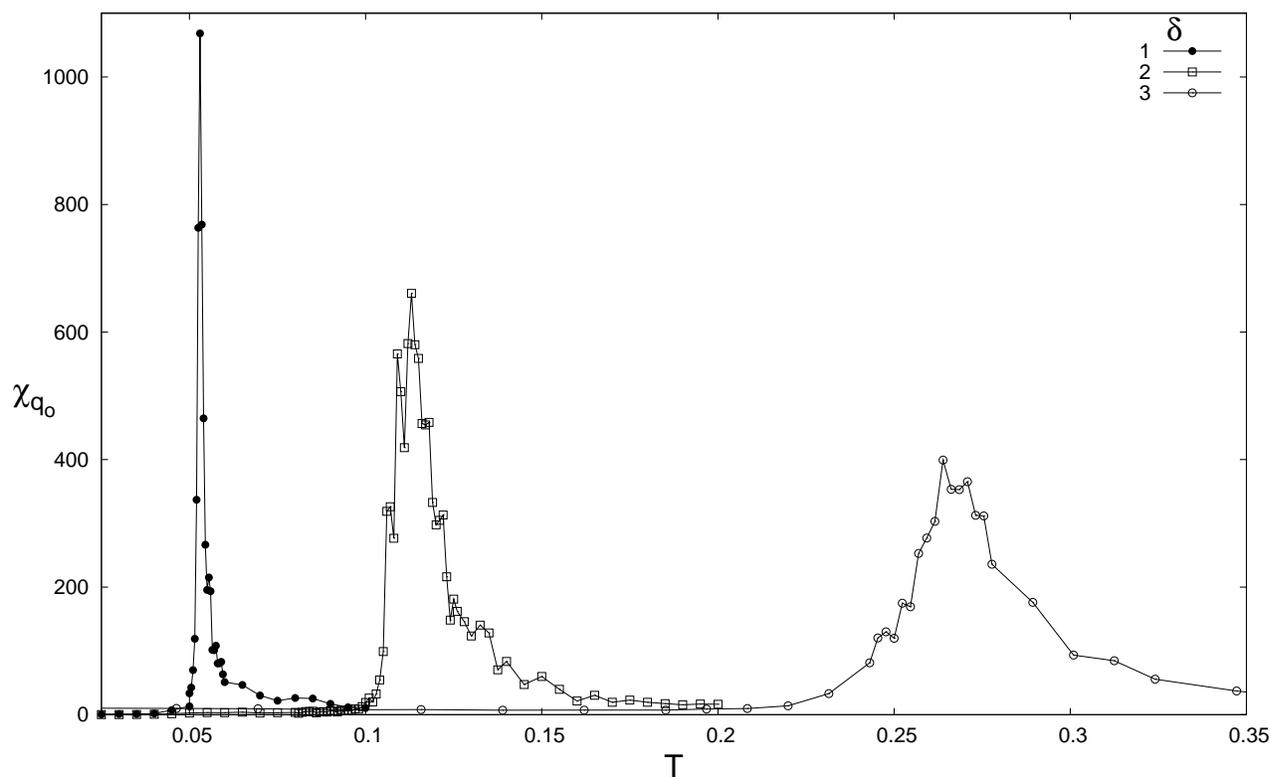


Figura 4.27: susceptibilidades do parâmetro de ordem nemático para os diferentes δ_s .

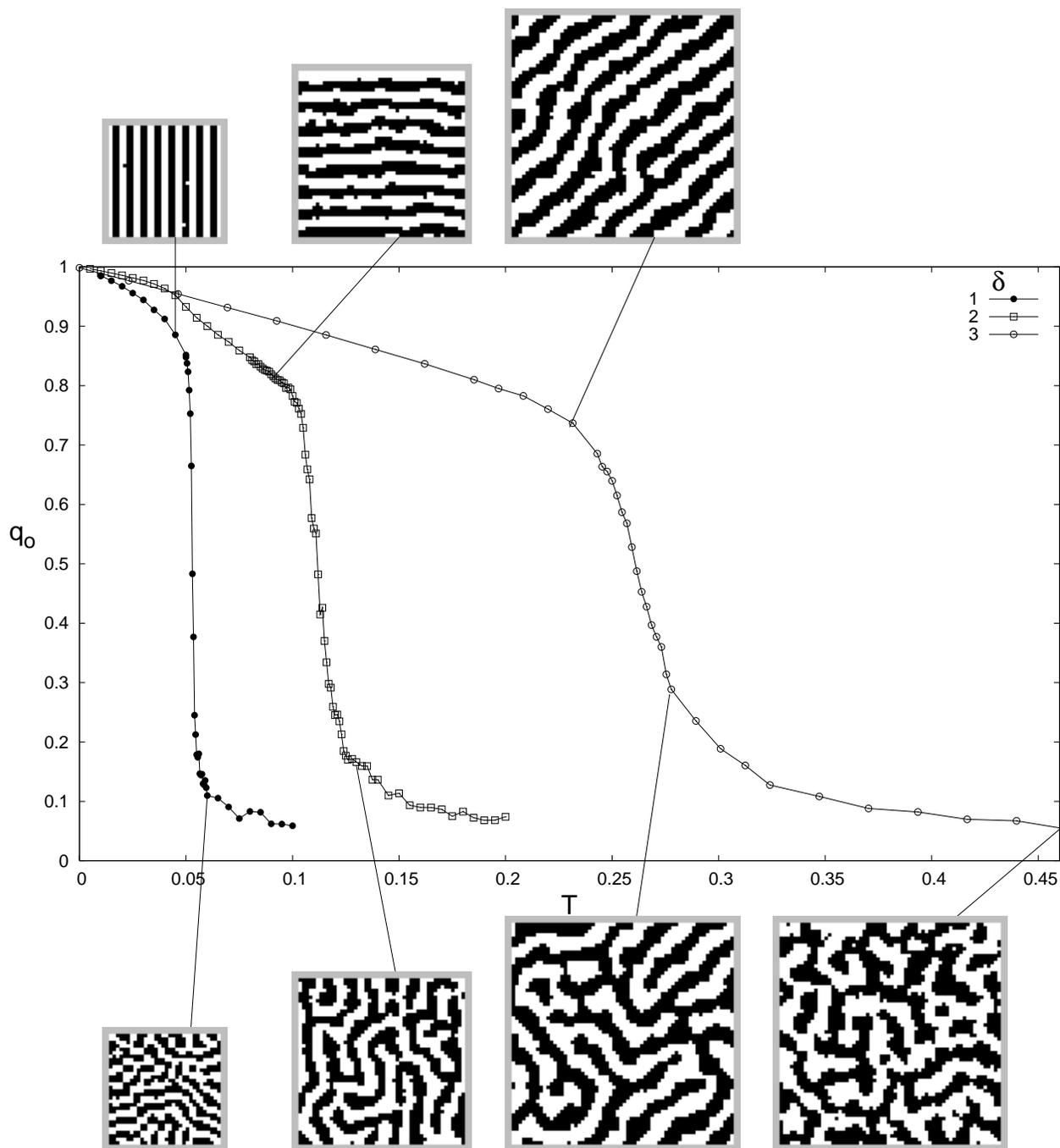


Figura 4.28: parâmetro de ordem nemático para os diferentes δ_s , com algumas configurações típicas apontadas (as figuras seguem a mesma proporção entre os diferentes tamanhos).

Capítulo 5

Conclusões

Após as primeiras considerações de Brazovskii e de Toner e Nelson, alguns trabalhos sobre o efeito de temperatura em filmes finos magnéticos se dedicaram a distinguir ou não uma fase intermediária entre o sólido bidimensional de faixas ordenadas e um líquido de paredes de domínios.

O trabalho teórico de Abanov *et al.*, com um modelo detalhado de filmes finos, obteve sob diferentes condições do modelo uma perda de ordens orientacional e posicional simultâneas levando a uma transição de primeira ordem, e duas transições contínuas mediadas pelo papel de defeitos topológicos em destruir a ordem.

As simulações apresentadas aqui pareceram comportar os dois tipos de transição. A definição do parâmetro de ordem orientacional, que é a ordem mais robusta (menos sensível a temperatura), captura bem as transições para a fase líquida para todas as faixas. A provável transição de primeira ordem para faixa 2 a coloca na classe de sistemas de Brazovskii, muito provavelmente pela sua natureza mais discretizada, com paredes mais abruptas, e pelo fato de compreender só dois sítios, onde compressões e sinuosidades são improváveis de ocorrer.

A faixa 3 apresentou fortes características de uma fase intermediária, separada das outras fases por uma transição contínua. Flutuações sinuosas nas paredes parecem quebrar a ordem posicional em temperaturas baixas, o que parece se repetir a temperaturas próximas de zero para faixa 4. A visualização das configurações dessa região intermediária permitiu identificar dislocações nessa fase.

Entretanto, essas são todas medidas dinâmicas e fora do equilíbrio. Para a caracterização efetiva da ordem nas faixas 3 e 4 e dos tipos de defeitos que elas suportam, as medidas devem ser de equilíbrio. Uma outra medida de ordem que deve ser implementada são as correlações espaciais associadas aos parâmetros de ordem [32]. Essas são algumas implementações imediatas.

Uma característica interessante do sistema para futuros estudos é a dinâmica lenta, causada principalmente pela frustração introduzida pela interação dipolar e o grande número associado de estado degenerados. Essa dinâmica lenta se apresentou nas presentes experiências de resfriamento, com a necessidade de taxas dT muito pequenas para atingir o estado fundamental. No comportamento complexo das fases intermediárias da faixa 4 também se apresentou um forte efeito dinâmico, resultando em uma histerese nessa região como fruto da alta metaestabilidade.

Ressalta-se que esse modelo contínuo teve sucesso em reproduzir características mesoscópicas dos filmes finos. Além das configurações mostradas ao longo do texto apresentando dislocações e disclinações (nota-se por exemplo na fig. 4.12, onde um defeito tipo espiral está centrado em duas disclinações côncavas), a figura 5.1 ao lado, para um tamanho dez vezes maior que os usados para as medidas, mostra uma fase com ordem orientacional local, em domínios, e separadas por muitas disclinações, lembrando a ordem de um cristal líquido nemático. Isso indica que a caracterização da fase de baixas temperaturas levando em conta tamanhos maiores pode ser relevante para compreender os tipos de ordem presentes no sistema. Nota-se também um defeito do tipo alvo, tal qual observados experimentalmente na figura (fig. 2.9).

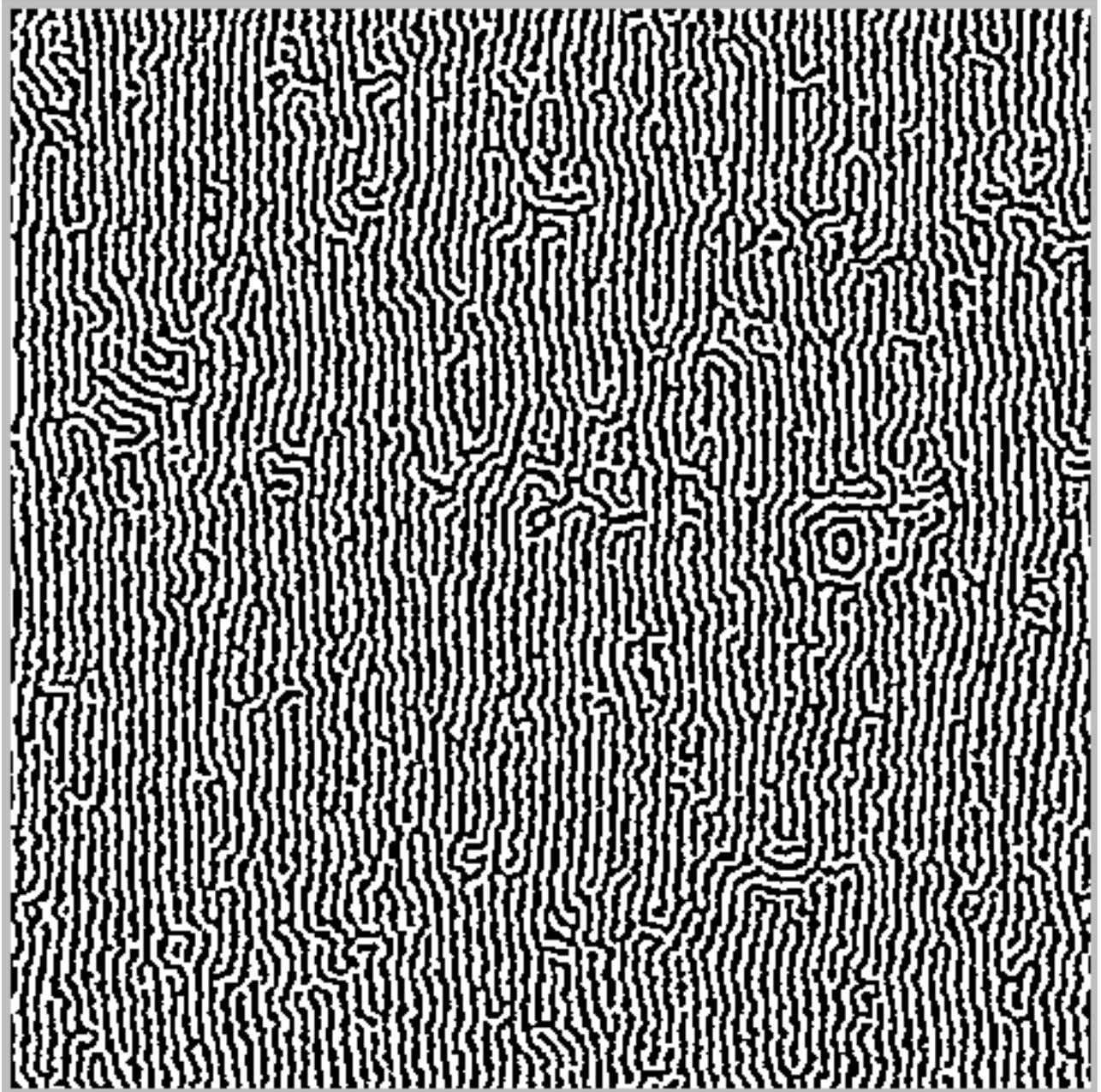


Figura 5.1: ordem orientacional local em uma configuração de um sistema $L = 480$ para $\delta = 2$. O sistema foi inicializado no estado fundamental a $T = 0$ e depois colocado a evoluir com $T = 0.13$.

Referências

- [1] SEUL, M. ; ANDELMAN, D. ; Domain shapes and patterns: the phenomenology of modulated phases. *Science* v. 267, p. 476-483, Jan. 1995.
- [2] CHAIKIN, P. M. ; LUBENSKY, T. C. ; Principles of condensed matter physics. Cambridge: Cambridge University, 1995. 699p.
- [3] CUESTA, J. A. ; FRENKEL, D. ; Monte Carlo simulation of two-dimensional hard ellipses. *Phys. Rev. A* v. 42, n. 4, p. 2126-2136, Aug. 1990.
- [4] POLITI, P. ; Domain structures in ultrathin magnetic films. Disponível em: <<http://arxiv.org/cond-mat/9712207>>. Acesso em: 27 maio 2005.
- [5] SEUL, M. ; WOLFE, R. ; Evolution of disorder in two-dimensional stripe patterns: "smectic" instabilities and disclination unbinding. *Phys. Rev. Lett.* v. 68, n. 16, p. 2460-2463, Apr. 1992.
- [6] DE'BELL, K. ; MACISAAC, A. B. ; WHITEHEAD, J. P. ; Dipolar effects in magnetic films and quasi-two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.* v. 72, n. 1, p. 225-257, Jan. 2000.
- [7] MACISAAC, A. B. ; WHITEHEAD, J. P. ; ROBINSON, M. C. ; DE'BELL, K. ; Stiped phases in two-dimensional dipolar ferromagnets. *Phys. Rev. B* v. 51, n. 22, p. 16033-16045, Jun. 1995.
- [8] YAFET, Y. ; GYORGY, E. M. ; Ferromagnetic strip domains in an atomic monolayer. *Phys. Rev. B* v. 38, n. 13, p. 9145-9151, Nov. 1988.
- [9] BRAZOVSKII, S. A. ; Phase transition of an isotropic system to a nonuniform state. *Sov. Phys.-JETP* v. 41, n. 1, p. 85-89, Jan. 1975.
- [10] TONER, J. ; NELSON, D. R. ; Smetic, cholesteric, and Rayleigh-Benard order in two dimensions. *Phys. Rev. B* v. 23, n. 1, p. 316-334, Jan. 1981.

-
- [11] NELSON, D. R. ; Defect-mediated phase transitions. In: DOMB, C. ; LEBOWITZ, J. L. ; (Ed.) *Phase transitions and critical phenomena* v. 7, p. 1-99, 1983.
- [12] STRANDBURG, K. J. ; Two-dimensional melting. *Rev. Mod. Phys.* v. 60, n. 1, p. 161-207, Jan. 1988.
- [13] GAREL, T. ; DONIACH, S. ; Phase transitions with spontaneous modulation - the dipolar Ising ferromagnet. *Phys. Rev. B* v. 26, n. 1, p. 325-329, Jul. 1982.
- [14] ABANOV, A. ; KALATSKY, V. ; POKROVSKY, V. L. ; SASLOW, W. M. ; Phase diagram of ultrathin ferromagnetic films with perpendicular anisotropy. *Phys. Rev. B* v. 51, n. 2, p. 1023-1038, Jan. 1995.
- [15] KASHUBA, A. B. ; POKROVSKY, V. L. ; Stripe domain structures in a thin ferromagnetic film. *Phys. Rev. Lett.* v. 70, n. 20, p. 3155-3158, May 1993.
- [16] BOOTH, I. ; MACISAAC, A. B. ; WHITEHEAD, J. P. ; DE'BELL, K. ; Domain structures in ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. Lett.* v. 75, n. 5, p. 950-953, Jul. 1995.
- [17] STOYCHEVA, A. D. ; SINGER, S. J. ; Computer simulations of a two-dimensional system with competing interactions. *Phys. Rev. E* v. 65, p. 036706(1-15), Feb. 2002.
- [18] CANNAS, S. A. ; STARIOLO, D. A. ; TAMARIT, F. A. ; Stripe-tetragonal first-order phase transition in ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B* v. 69, p. 092409(1-4), Mar. 2004.
- [19] VATERLAUS, A. ; STAMM, C. ; MAIER, U. ; PINI, M. G. ; POLITI, P. ; PESCIA, D. ; Two-step disordering of perpendicularly magnetized ultrathin films. *Phys. Rev. Lett.* v. 84, n. 10, p. 2247-2250, Mar. 2000.
- [20] PORTMANN O. ; VATERLAUS, A. ; PESCIA, D. ; An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films. *Nature*, v. 422, p. 701-704, Apr. 2003.
- [21] BINNEY, J. J. ; DOWRICK, N. J. ; FISHER, A. J. ; NEWMAN, M. E. J. ; The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group. Oxford: Clarendon, 1992. 464p.
- [22] KUBO, R. ; The fluctuation-dissipation theorem. In: EDWARDS, S. F. ; (Ed.) *Many body problems* p. 235-265, 1969.
- [23] STARIOLO, D. A. ; Introdução a dinâmica de sistemas fora do equilíbrio. Disponível em: <http://www.if.ufrgs.br/~stariolo/fis1050_2005.ps>. Acesso em: 20 junho 2005.

-
- [24] STARIOLO, D. A. ; Introdução à dinâmica de sistemas desordenados. Disponível em: <http://www.if.ufrgs.br/~stariolo/dinamica_04.ps.gz>. Acesso em: 27 maio 2005.
- [25] POMEAU, Y. ; MANNEVILLE, P. ; Stability and fluctuations of a spatially periodic convective flow. *J. Phys. (Paris)* v. 40, n. 23, p. L(609-612), Dec. 1979.
- [26] ROLAND, C. ; DESAI, R. C. ; Kinetics of quenched systems with long-range repulsive interactions. *Phys. Rev. B* v. 42, n. 10, p. 6658-6669, Oct. 1990.
- [27] BERTHIER, L. ; BARRAT, J. L. ; KURCHAN, J. ; Response function of coarsening systems. *Eur. Phys. J. B* v. 11, n. 10, p. 635-641, Oct. 1999.
- [28] ROGERS, T. M. ; ELDER, K. R. ; DESAI, R. C. ; *Phys. Rev. B* v. 37, n. 16, p. 9638-9649, Jun. 1988.
- [29] ALLEN, M. P. ; TILDESLEY, D. J. Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon, 1997. 385p.
- [30] PRESS, W. H. ; TEUKOLSKY, S. A. ; VETTERLING, W. T. ; FLANNERY, B. P. ; Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing, 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1992. 994p.
- [31] FRIGO, M. ; JOHNSON, S. G. ; The design and implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE* v. 93, n. 2, p. 216-231, Feb. 2005.
- [32] CHRISTENSEN, J. J. ; BRAY, A. J. ; Pattern dynamics of Rayleigh-Bénard convective rolls and weakly segregated diblock copolymers. *Phys. Rev. E* v. 58, n. 5 p. 5364-5370, Nov. 1998.
- [33] QUIAN, H. ; MAZENKO, G. F. ; Defect structures in the growth kinetics of the Swift-Hohenberg model. *Phys. Rev. E* v. 67, 036102(1-12), Mar. 2003.