



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
BACHARELADO EM FÍSICA**

**DANILO EMANUEL BARRETO DE OLIVEIRA**

**FASES DO TIPO CRISTAL LÍQUIDO E DEFEITOS TOPOLÓGICOS  
EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS COM INTERAÇÕES  
COMPETITIVAS**

**PORTO ALEGRE**

**2017**

DANILO EMANUEL BARRETO DE OLIVEIRA

FASES DO TIPO CRISTAL LÍQUIDO E DEFEITOS  
TOPOLÓGICOS EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS  
COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS

Monografia apresentada ao Instituto de Física da  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul como  
requisito para obtenção do título de Bacharel em Física.

Área de pesquisa: Mecânica Estatística, Matéria  
Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Miguel A. C. Gusmão

Coorientador: Prof. Dr. Alejandro Mendoza Coto.

Porto Alegre  
2017

Em memória de  
Isolina Barreto do Carmo Coelho.

---

# Agradecimentos

---

Agradeço, primeiramente, à minha mãe, Vera Barreto, que me proveu recursos durante toda a vida e possibilitou que eu escolhesse a via dos estudos.

Agradeço aos meus orientadores, Miguel Ângelo Cavalheiro Gusmão e Alejandro Mendoza-Coto pela orientação e pelo auxílio para a conclusão deste trabalho.

Agradeço, ainda, às famílias Zanchet, Mendoza-Coto e Battú pelo alento e pela amizade que me ofereceram durante o meu período em Porto Alegre.

Finalmente, agradeço aos contribuintes brasileiros, à instituição UFRGS e seus servidores, que, de um modo ou de outro, contribuíram para a minha formação.

"To see a World in a Grain of Sand  
And a Heaven in a Wild Flower,  
Hold Infinity in the palm of your hand  
And Eternity in an hour."

William Blake

---

# Resumo

---

O fenômeno das transições de fase em sistemas físicos com interações competitivas pode resultar da presença de defeitos topológicos. Neste estudo, focalizamos sistemas bidimensionais com forte anisotropia, apresentando uma interação atrativa de curto alcance competindo com uma repulsiva de longo alcance. Utilizamos resultados prévios da teoria clássica da fusão orientacional, que é parte da conhecida teoria de Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTNHY), para obter e analisar diagramas de fases em diferentes regimes de parâmetros do sistema.

**Palavras-chave:** transições de fase, diagrama de fases, interações competitivas, defeitos topológicos.

---

# Abstract

---

Phase transitions in physical systems with competing interactions can occur due to the existence of topological defects. In this study we shall focus our work on strongly anisotropic systems presenting a short range attractive interaction and a long range repulsive interaction, using previous results from Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTNHY) theory in order to obtain phase diagrams.

**Keywords:** phase. phase transition. phase diagram.

---

# Sumário

---

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Fundamentação Teórica</b>	<b>13</b>
2.1	Modelo . . . . .	13
2.1.1	Interações de Troca e Dipolar . . . . .	13
2.1.2	Termo Zeeman . . . . .	14
2.1.3	Energia livre . . . . .	15
2.1.4	Aproximação de Campo Médio . . . . .	15
2.1.5	Formulação contínua . . . . .	16
2.1.6	Entropia do Sistema . . . . .	17
2.2	Espectro de Flutuações . . . . .	19
2.2.1	Energia Livre no Espaço de Fourier . . . . .	20
2.3	Soluções . . . . .	20
2.3.1	Cálculo da Temperatura Crítica . . . . .	22
2.4	Diagramas de Fases . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Transições Mediadas por Defeitos</b>	<b>27</b>
3.1	Transições Mediadas por Defeitos Topológicos . . . . .	27
3.1.1	Descrição da Fase Nemática no Sistema de Faixas. . . . .	27
3.1.2	Descrição da Fase Esmética do Sistema de Bolhas . . . . .	32
3.1.3	Transição Hexática . . . . .	35
3.2	Diagramas com Fases Topológicas . . . . .	36

**4 Conclusões**

**40**

**Referências Bibliográficas**

**42**

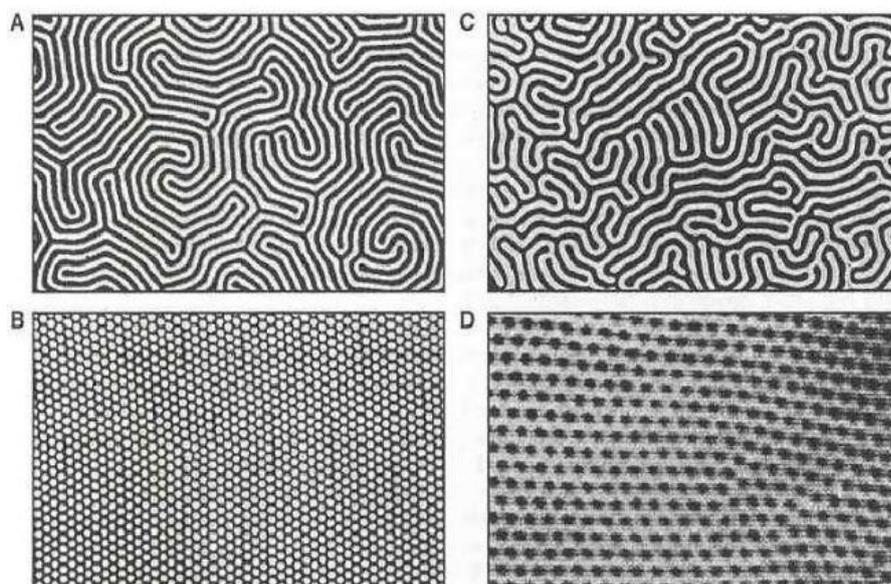
# INTRODUÇÃO

---

Diversos sistemas, sejam físicos, químicos ou biológicos, apresentam uma grande variedade de estruturas ordenadas, formando fases que apresentam distintas e interessantes propriedades. As fases se estabelecem no sistema como consequência de instabilidades frente à formação de padrões ou texturas, instabilidades essas que promovem a quebra de simetrias e um maior ordenamento do sistema. Parâmetros que medem o quanto um sistema se encontra ordenado são denominados parâmetros de ordem [1]. Fases moduladas, formadas por algum parâmetro de ordem, variam desde morfologias mais simples, como *stripes* (faixas) e *bubbles* (bolhas), exemplificadas, respectivamente, em A e B na figura 1, até lamelas, cilindros, esferas, padrões labirínticos (C na figura 1) e outras estruturas em três dimensões espaciais [2]. Exemplos vão desde sistemas da matéria condensada mole, como mono-camadas de Langmuir [3], até sistemas de estado sólido, como filmes magnéticos ultrafinos [4].

A competição entre uma interação atrativa de curto alcance e outra repulsiva de longo alcance é característica comum nesses sistemas [2]. Por meio dessa informação e de adequado suporte teórico, podemos considerar modelos para estudar como se dão as transições de fases em sistemas desse tipo e as propriedades dessas fases, como a existência ou não de ordem posicional e/ou orientacional e suas regiões de estabilidade. Essas informações são úteis e de fundamental importância para a ciência, uma vez que o controle da formação de padrões em sistemas de matéria condensada mole [5, 6, 7, 8] é uma área de muita atividade atualmente, em face das potenciais aplicações, como a produção de moldes nanoscópicos para posterior deposição de nanocircuitos. Já a presença de estruturas em sistemas de estado sólido, como filmes magnéticos ultrafinos [4, 9, 10], pode ter importância para aplicações em memórias de computador e futuras aplicações de spintrônica.

A visualização usual das regiões de estabilidade de cada fase em sistemas com interações competitivas é por meio de um diagrama de fases. As características básicas gerais do diagrama de fases para sistemas nas condições já citadas é bem conhecida em aproximações de campo médio. Entretanto, fenômenos a temperaturas mais baixas, como transições de uma fase mais ordenada para uma menos ordenada ao se reduzir a temperatura (caracterizando uma quebra



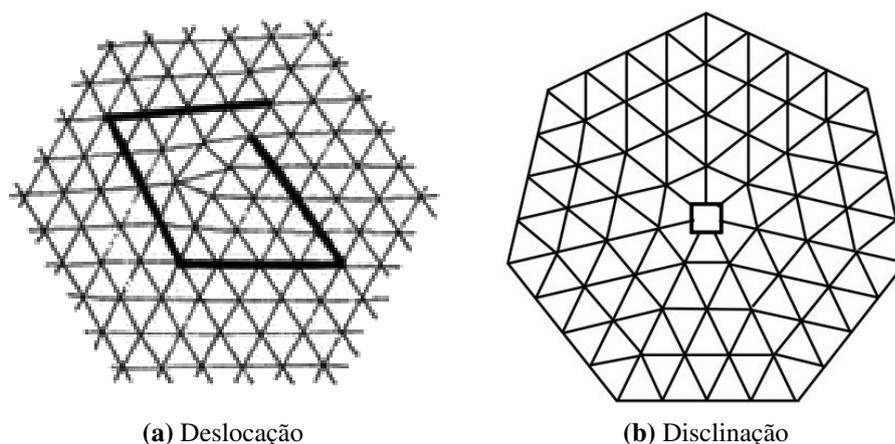
**Figura 1:** Domínios em fluidos e sólidos magnéticos. Fase de faixas (A) e bolhas (B) alternando magnetização positiva (em branco) e negativa (em preto) em um filme magnético de granada (magnetic garnet film). (C e D) Ferrofluido confinado entre duas placas de vidro, sujeito a um campo magnético perpendicular à camada de fluido exibindo fases labirínticas (C) e de bolhas (D). [2]

inversa de simetria ou comportamento reentrante) ainda carecem de melhor explicação.

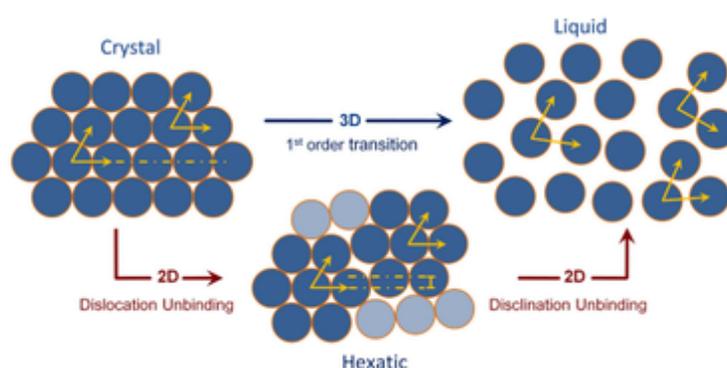
Outra discussão de crucial importância é a existência ou não de fases que apresentam ordem posicional e/ou orientacional. A presença de defeitos topológicos pode vir a mediar transições de fase em que há a quebra de simetria frente a rotações e/ou translações no sistema.

Tais transições são observadas, por exemplo, em um sistema de faixas, um estado rico em defeitos topológicos com grande mobilidade. Neste cenário, são restauradas as simetrias translacional e orientacional devido à desordem promovida pelos defeitos, dando origem a uma fase chamada de líquido de faixas, onde a ordem orientacional e posicional dos padrões existe só localmente. Para temperaturas menores, as interações presentes no sistema podem dar lugar a uma fase onde os defeitos permitem ordem orientacional de quase longo alcance, mas ordem posicional somente de curto alcance. Dessa maneira, temos a chamada fase nemática.

O quadro análogo de transições em um sistema de bolhas, previsto pela teoria clássica do *melting*, ou teoria KTHNY, é ainda mais interessante. Na fase de baixa temperatura, o sistema de bolhas –análogo a um sistema bidimensional de partículas– possui uma fase sólida, também chamada de fase esmética (Fig. 3a), na qual existe ordem posicional de quase longo alcance e ordem orientacional de longo alcance. Aumentando a temperatura, defeitos topológicos conhecidos como deslocamentos (Fig. 2a), enfraquecem a estrutura triangular de bolhas e levam o sistema a uma fase intermediária entre a fase sólida e a líquida, na qual existe ordem posici-



**Figura 2:** Defeitos Topológicos em uma rede triangular. [11]



**Figura 3:** Representação esquemática do processo de melting da fase cristalina para a fase líquida. O melting em 3D é um processo de passo único, enquanto em 2D pode acontecer envolvendo uma fase intermediária chamada hexática, proposta pela teoria KTHNY. Na fase cristalina, tanto a ordem posicional quanto a ordem orientacional são de longo alcance, como indicado pelas setas amarelas, enquanto na fase líquida ambas as ordens são de curto alcance. Na fase hexática, entretanto, a ordem posicional é de curto alcance, mas a ordem orientacional é de longo alcance. [12]

onal de curto alcance e ordem orientacional de quase longo alcance. Essa fase intermediária é conhecida como fase hexática (Fig. 3a). Ela é para o sistema de bolhas a fase equivalente à nemática para o sistema de faixas. Já na fase hexática uma nova classe de defeitos torna-se relevante, as chamadas disclinações (Fig. 2b). Um aumento adicional da temperatura produz a proliferação de pares de disclinações, o que termina por levar o sistema a uma fase de líquido de bolhas (Fig. 3a), onde somente temos ordem orientacional e posicional de curto alcance.

Nesta monografia, apresentamos um estudo teórico das fases em sistemas isotrópicos com interações competitivas, visando caracterizar os comportamentos de quantidades como a amplitude do parâmetro de ordem (a magnetização, no nosso caso) em função da temperatura. Construindo o hamiltoniano e a entropia apropriados, é estudada a evolução dos diagramas de fases do sistema, na aproximação de campo médio, variando o custo energético relativo da fase

homogênea em relação à fase modulada. Foi observado um aumento contínuo do comportamento reentrante à medida que o custo energético característico da fase homogênea aproxima-se daquele correspondente à fase modulada.

No capítulo 3, é considerada a presença de flutuações e defeitos topológicos [13, 14]. A descrição analítica dessas fases é complexa, pois os defeitos representam singularidades nas configurações do parâmetro de ordem, o que escapa a descrições usuais de campo médio. Foi, portanto, necessária a utilização de técnicas mais sofisticadas, como expansões perturbativas e grupo de renormalização. Como resultado do emprego dessas técnicas, obtemos diagramas de fases mais ricos, apresentando as regiões onde se observa a existência ou não de simetria posicional e/ou simetria orientacional de quase longo alcance.

---

# FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

---

## 2.1 Modelo

Embora o formalismo empregado aqui seja bastante genérico, vamos considerar como sistema de nosso estudo uma rede bidimensional de spins (representando momentos magnéticos), com parâmetro de rede unitário (a fim de simplificar notação e conversões). Vamos considerar, ainda, que existe uma forte anisotropia favorecendo a orientação dos spins perpendicularmente ao plano da rede. Tais características são efetivamente observadas em certos filmes finos magnéticos. Nessa situação, apenas a componente perpendicular do momento magnético é relevante, podendo ser representada por spins de Ising.

Se o sistema apresenta ordem magnética, seja espontânea, por efeito de interações, ou induzida pela aplicação de um campo magnético, isso pode ser caracterizado pelo valor não nulo da **magnetização**, que é definida como o momento magnético médio por unidade de volume (ou, neste caso, de área) do sistema. Supondo a possibilidade de ordem não uniforme, a magnetização pode ser dependente de posição, e vamos denotá-la por  $m_i$ , com valor de saturação  $m$ , onde  $i$  denota um sítio da rede. Obviamente,  $m_i$  é proporcional ao **valor médio** do momento magnético local,  $\langle \mu_i \rangle$ , com valor de saturação  $\mu$ . Podemos, então definir uma magnetização normalizada

$$\phi_i = \frac{\langle m_i \rangle}{m} = \frac{\langle \mu_i \rangle}{\mu}. \quad (2.1)$$

### 2.1.1 Interações de Troca e Dipolar

As interações entre spins são essencialmente de dois tipos: a interação de *troca* e a interação *dipolar magnética*. A interação de troca é consequência da repulsão coulombiana entre elétrons, aliada à antissimetria da função de onda (que leva ao Princípio de Exclusão de Pauli). Ela surge sempre que houver sobreposição das funções de onda entre elétrons de átomos vizinhos. É uma interação de curto alcance pois essa superposição decresce rapidamente com a distância. Como as diferenças de energia vão estar diretamente associadas às orientações relativas dos momentos

magnéticos, a interação de troca é modelada por um hamiltoniano do tipo

$$H_{tr} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J \mu_i \mu_j, \quad (2.2)$$

que constitui o modelo de Heisenberg para spins vetoriais, e recai aqui no modelo de Ising, pela restrição a uma única componente do spin. A *constante de troca*  $J$  pode ser positiva ou negativa, dependendo de detalhes microscópicos associados aos estados atômicos envolvidos. No caso em que  $J$  é positiva, a interação favorece o alinhamento paralelo de spins vizinhos, levando ao ordenamento *ferromagnético* do sistema. Esta é a situação que abordaremos aqui.

A interação dipolar magnética é uma interação *clássica* entre momentos de dipolo magnético. Para o caso aqui considerado, em que os momentos têm direções paralelas devido à anisotropia, a interação dipolar favorece o ordenamento em **sentidos opostos**, o que corresponderia a uma ordem antiferromagnética. Entretanto, como a sua intensidade é significativamente menor que a da interação de troca, ela só se torna efetiva a grandes distâncias, levando à quebra da ordem ferromagnética em *domínios* de orientações opostas. Esse efeito se deve ao longo alcance da interação dipolar, que pode ser descrita por um hamiltoniano da forma

$$H_d = \frac{J}{2\delta} \sum_{i,j} \frac{1}{(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)^3} \mu_i \mu_j, \quad (2.3)$$

aqui parametrizada pela constante de troca e um fator de redução  $\delta$ , que descreve a intensidade relativa entre as duas interações. Como se pode ver pela expressão acima, a interação dipolar é de longo alcance, decaindo com o inverso do cubo da distância entre os spins.

Somando as contribuições de troca e dipolar, pode escrever um hamiltoniano de interação

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{i,j} \mu_i \mu_j, \quad (2.4)$$

onde

$$A_{ij} = -J \delta_{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|,1} + \frac{J}{\delta} \frac{1}{(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)^3}. \quad (2.5)$$

### 2.1.2 Termo Zeeman

O termo Zeeman descreve o efeito de um campo magnético externo aplicado ao sistema, que atua no sentido de alinhar os spins em uma dada direção. No nosso caso, só tem sentido um campo transversal ao plano da rede, que pode ser associado a uma variável escalar  $h$ , sendo sua

contribuição descrita pelo hamiltoniano

$$H_Z = -h \sum_i \mu_i. \quad (2.6)$$

### 2.1.3 Energia livre

De modo geral, a busca de estados de equilíbrio termodinâmico em um sistema físico envolve a determinação de mínimos da energia livre. Por hipótese, o sistema pode trocar energia com um *reservatório* externo, de forma a manter uma temperatura absoluta definida. Neste caso, e energia livre relevante é a de Helmholtz, definida por

$$F = E - TS, \quad (2.7)$$

onde  $T$  é a temperatura do sistema,  $E$  é a sua energia interna e  $S$  é sua entropia.

É, portanto, necessário obter expressões para a energia interna e a entropia em função do parâmetro de ordem e das constantes que descrevem as interações.

A energia interna é dada pelo valor médio do hamiltoniano,  $E = \langle H \rangle$ , que envolve os valores médios das energias associadas às interações e à presença de um campo magnético. Temos, assim,

$$\langle H \rangle = \langle H_{int} \rangle + \langle H_Z \rangle, \quad (2.8)$$

com as contribuições ao hamiltoniano nos termos do lado direito dados pelas Eqs. (2.4) e (2.6). Em conexão com a energia interna  $E$  que aparece na Eq. (2.7), a Eq. (2.8) corresponde a

$$E = E_{int} + E_Z. \quad (2.9)$$

### 2.1.4 Aproximação de Campo Médio

Poucos modelos de mecânica estatística podem ser resolvidos exatamente. Na maioria dos casos, é necessário recorrer a métodos de aproximação, que simplifiquem o problema e, ainda assim, permitam-nos prever importantes propriedades do sistema estudado. Dentre os métodos de aproximação mais utilizados está a aproximação de campo médio.

A teoria de campo médio teve sua origem histórica no ano de 1873, pelo cientista holandês van der Waals [15], com a aproximação da equação de estado de um líquido clássico. No início do século XX, Pierre Weiss desenvolve técnica equivalente para estudar a transição de fase em materiais ferromagnéticos. Mais tarde, E. J. Williams e W. L. Bragg [16] desenvolveram uma

aproximação de campo médio equivalente à de Weiss, mas que pode ser generalizada facilmente para a diferentes sistemas.

A essência da técnica de aproximação de campo médio para um sistema de spins consiste na hipótese de independência estatística, de modo que cada um dos spins "sinta" o efeitos das interações com os demais de igual forma (valor médio) e as flutuações dessas contribuições seja desprezada. Por conseguinte, a aproximação a campo médio é adequada nos casos em que a quantidade de vizinhos interagentes é muito grande ou, formalmente, no caso em que a dimensão espacial do sistema seja muito grande.

Utilizaremos a aproximação de campo médio para obter uma expressão para a energia livre de Helmholtz do nosso sistema em termos da magnetização normalizada.

O valor médio do hamiltoniano que descreve as interações pode ser desenvolvido como segue.

$$\begin{aligned}
 \langle H_{int} \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{i,j} \langle \mu_i \mu_j \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{i,j} (\langle (\mu_i - \langle \mu_i \rangle) + \langle \mu_i \rangle \rangle (\langle (\mu_j - \langle \mu_j \rangle) + \langle \mu_j \rangle \rangle) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{i,j} \langle \mu_i \rangle \langle \mu_j \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{i,j} \langle (\mu_i - \langle \mu_i \rangle) (\mu_j - \langle \mu_j \rangle) \rangle. \quad (2.10)
 \end{aligned}$$

Na aproximação de campo médio, o último termo na equação acima, que descreve as correlações das flutuações dos momentos magnéticos, é desprezado. Portanto, nessa aproximação,

$$E_{int} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{i,j} \langle \mu_i \rangle \langle \mu_j \rangle. \quad (2.11)$$

O valor médio do termo de Zeeman é trivialmente escrito em termos dos valores médios dos momentos magnéticos,

### 2.1.5 Formulação contínua

No estudo de transições de fase, quando detalhes microscópicos perdem importância, é usual considerar os parâmetros de ordem como funções contínuas da posição, o que pode ser interpretado como um "coarse graining" das quantidades microscópicas. Assim, a magnetização normalizada  $\phi$ , definida na Eq. (2.1), passa a ser vista como uma função  $\phi(\vec{x})$ , onde  $\vec{x}$  é um vetor bidimensional que denota uma posição no plano do sistema. Em consequência, as somas sobre sítios da rede transformam-se em integrais sobre as posições.

Aplicando esse procedimento à energia de interação, temos

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{i,j} \langle \mu_i \rangle \langle \mu_j \rangle = \frac{\mu^2}{2} \int \int d^2\vec{x} d^2\vec{x}' A(|\vec{x} - \vec{x}'|) \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}') . \quad (2.12)$$

Portanto, podemos escrever

$$E_{int} = \int \int d^2\vec{x} d^2\vec{x}' A'(|\vec{x} - \vec{x}'|) \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}') , \quad (2.13)$$

onde  $A'(|\vec{x} - \vec{x}'|) = \mu^2 A(|\vec{x} - \vec{x}'|)$ . Da mesma forma, pela Eq. (2.6) temos que

$$E_Z = -h' \int d^2\vec{x} \phi(\vec{x}) , \quad (2.14)$$

onde  $h' = \mu h$ .

## 2.1.6 Entropia do Sistema

Para completar a obtenção da energia livre, precisamos construir a função de entropia na aproximação de campo médio. Em um sistema quântico genérico, a entropia pode ser matematicamente expressa como

$$S = -k_B \text{Tr}(\rho \ln \rho) , \quad (2.15)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $\rho$  é a *matriz densidade* do sistema, que é um operador.

Na aproximação de campo médio, o operador hamiltoniano do sistema é dado pelo somatório das contribuições do hamiltoniano de cada sítio, sendo que o hamiltoniano de um sítio é constituído de um *campo efetivo* atuando sobre o momento magnético quântico,

$$H = \sum_i H_i = - \sum_i h_i \mu_i \quad (2.16)$$

A matriz densidade do sistema é, neste caso, um produto de matrizes densidade por sítio, na forma

$$\rho = \prod_i \rho_i = \prod_i \left( \frac{e^{-\beta H_i}}{Z_i} \right) , \quad (2.17)$$

onde  $\beta = 1/(k_B T)$  e  $Z_i = \text{Tr}(e^{-\beta H_i})$  é a função de partição local. Como os possíveis valores do momento magnético são  $\mu_i = \pm \mu$ , temos que

$$\rho_i = \frac{1}{2 \cosh(\beta h_i \mu)} \begin{pmatrix} e^{\beta h_i \mu} & 0 \\ 0 & e^{-\beta h_i \mu} \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Substituindo (2.18) em (2.17) e usando (2.15), obtemos

$$S = -k_B \sum_i \left[ \frac{e^{\beta h_i \mu}}{2 \cosh(\beta h_i \mu)} \ln \left( \frac{e^{\beta h_i \mu}}{2 \cosh(\beta h_i \mu)} \right) + \frac{e^{-\beta h_i \mu}}{2 \cosh(\beta h_i \mu)} \ln \left( \frac{e^{-\beta h_i \mu}}{2 \cosh(\beta h_i \mu)} \right) \right] \quad (2.19)$$

Para expressar a entropia em termos do parâmetro de ordem, devemos usar a relação de auto-consistência

$$\langle \mu_i \rangle = \text{Tr}(\rho_i \mu_i) = \mu \frac{\sinh(\beta h_i \mu)}{\cosh(\beta h_i \mu)}. \quad (2.20)$$

Consequentemente,

$$\frac{e^{\pm \beta h_i \mu}}{\cosh(\beta h_i \mu)} = \frac{\cosh(\beta h_i \mu) \pm \sinh(\beta h_i \mu)}{\cosh(\beta h_i \mu)} = 1 \pm \frac{\langle \mu_i \rangle}{\mu}. \quad (2.21)$$

Substituindo (2.21) em (2.19), temos finalmente a expressão da entropia como função da razão entre o momento magnético local e o seu valor de saturação,

$$\begin{aligned} S[\langle \mu_i \rangle / \mu] &= -k_B \sum_i \left( \frac{1 + \langle \mu_i \rangle / \mu}{2} \right) \ln \left( \frac{1 + \langle \mu_i \rangle / \mu}{2} \right) \\ &+ k_B \sum_i \left( \frac{1 - \langle \mu_i \rangle / \mu}{2} \right) \ln \left( \frac{1 - \langle \mu_i \rangle / \mu}{2} \right). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Passando para a formulação contínua, obtemos a entropia na forma

$$S[\phi(\vec{x})] = -k_B \int d^2 \vec{x} \left[ \left( \frac{1 + \phi(\vec{x})}{2} \right) \ln \left( \frac{1 + \phi(\vec{x})}{2} \right) + \left( \frac{1 - \phi(\vec{x})}{2} \right) \ln \left( \frac{1 - \phi(\vec{x})}{2} \right) \right]. \quad (2.23)$$

Finalmente, pelas Eqs. (2.7), (2.9), (2.13), (2.14) e (2.23), a energia livre pode ser expressa na forma de um funcional do parâmetro de ordem,

$$F[\phi] = \frac{1}{2} \int \int d^2 \vec{x} d^2 \vec{x}' A'(|\vec{x} - \vec{x}'|) \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}') - h' \int d^2 \vec{x} \phi(\vec{x}) - T S[\phi(\vec{x})]. \quad (2.24)$$

Esta expressão permite determinar as possíveis fases do sistema, caracterizadas por diferentes padrões espaciais do parâmetro de ordem que minimizem o funcional  $F[\phi]$ . Diferentes soluções poderão ser estáveis, dependendo das regiões de valores de campo magnético, da temperatura e dos parâmetros que descrevem as interações entre spins.

## 2.2 Espectro de Flutuações

Os cálculos que precisamos realizar serão facilitados se passarmos do espaço de coordenadas para o de vetores de onda. Para isso, definimos a representação de Fourier de uma função genérica  $f(\vec{x})$ , introduzindo a sua transformada de Fourier  $f(\vec{k})$  através das relações

$$f(\vec{x}) = \int \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} f(\vec{k}), \quad (2.25)$$

$$f(\vec{k}) = \int d^2\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} f(\vec{x}). \quad (2.26)$$

Aplicando essas relações ao termo do funcional da energia livre referente às interações de troca e dipolar, obtém-se que

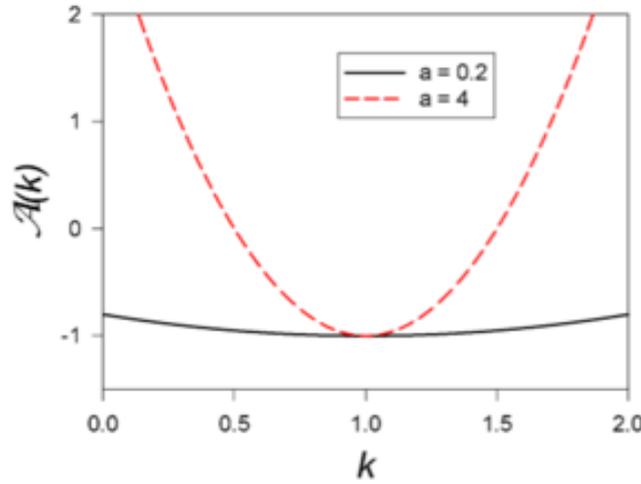
$$\frac{1}{2} \int \int d^2\vec{x} d^2\vec{x}' A'(|\vec{x} - \vec{x}'|) \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}') = \frac{1}{2} \int d^2\vec{k} A'(\vec{k}) \phi(\vec{k}) \phi(-\vec{k}). \quad (2.27)$$

A função  $A(\vec{k})$  é uma quantidade central no nosso estudo, pois determina o *espectro de flutuações* do parâmetro de ordem. Os sistemas que são objeto deste estudo apresentam interações rotacionalmente invariantes (isotrópicas). Como consequência,  $A(\vec{k}) = A(k)$ , dependente apenas do módulo do vetor de onda. Pela presença de interações competitivas, espera-se que sejam observados *padrões modulados*. Para isso,  $A(k)$  deve ter um mínimo negativo em algum vetor de onda não nulo  $k_{min}$ , o que garante a estabilidade dos modos próximos à circunferência de raio  $k_{min}$ . O valor de  $k_{min}$  estabelece, portanto, uma espécie de comprimento característico para o sistema. Em vista disso, a partir de agora passamos a expressar os vetores de onda em unidades de  $k_{min}$  (o que implica em  $k_{min} = 1$ ) e todos os comprimentos em unidades de  $\frac{2\pi}{k_{min}}$ . Além disso, convencionamos que  $A'(1) = -1$  de modo a cumprir a condição de ter um mínimo negativo. Tendo em conta que  $A'(k)$  deve variar quadraticamente no entorno do mínimo, tem sido usada [17, 18, 19] a forma modelo

$$A'(k) = -1 + a(k - 1)^2 \quad (2.28)$$

para sistemas aqui considerados. Este modelo apresenta bons resultados na descrição de filmes finos ferromagnéticos com forte anisotropia perpendicular, nos quais a interação dipolar de longo alcance compete com a interação ferromagnética de troca [20]. O único parâmetro livre no espectro de flutuações é o parâmetro de curvatura  $a$ .

A figura 4 mostra dois casos distintos de  $A(k)$ . Os diagramas de fase variam bastante em função do parâmetro de curvatura considerado para o espectro de flutuações.



**Figura 4:** Espectro de flutuações  $A(k)$  como modelado pela Eq. (2.28) para dois valores do parâmetro de curvatura:  $a = 0.2$  e  $a = 4$ . [21]

### 2.2.1 Energia Livre no Espaço de Fourier

Podemos expressar a energia livre, Eq. (2.24), em termos de amplitudes de Fourier:

$$f[\phi] = \frac{F[\phi]}{\Omega} = \frac{1}{2}A'(0)c_0^2 + \frac{1}{4}\sum_{i>0}A'(\vec{k}_i)c_i^2 - \frac{T}{\Omega}S[\phi(\vec{x})] - h'c_0, \quad (2.29)$$

onde  $\Omega$  é a área do sistema, e  $c_0 \equiv \phi(k=0)$  é a amplitude do modo uniforme. A expressão (2.29) é escrita apenas em termos de variáveis adimensionais, tornando-se apropriada ao cálculo numérico-computacional. Note que não indicamos qualquer alteração do funcional entropia. Na prática, como em geral se busca a determinação de linhas de separação de fases, a amplitude do parâmetro de ordem é pequena, permitindo expandir o integrando da Eq. (2.23) em potências desse parâmetro, que é então expresso em termos de suas componentes de Fourier.

## 2.3 Soluções

Para o tipo de sistemas que estamos analisando, é bem sabido que as soluções que minimizam a Eq. (2.24) a baixas temperaturas são funções periódicas no espaço, na forma de faixas (listras) ou bolhas (bolhas) [22, 2]. A solução geral pode ser representada como uma expansão em série de Fourier na forma

$$\phi(\vec{x}) = c_0 + \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cos(\vec{k}_i \cdot \vec{x}). \quad (2.30)$$

Diferentes conjuntos de vetores de onda  $\{\vec{k}_i\}$  definem diferentes padrões, sendo parte do problema definir o conjunto adequado de vetores de onda de modo a construir os padrões es-

perados (faixas e bolhas). Podemos escrever  $\vec{k}$  na Eq. (2.30) em termos de suas componentes  $(k_x, k_y)$  na forma

$$\vec{k}_i = k_o i(1,0); \quad i = 1,2,3,\dots \quad (2.31)$$

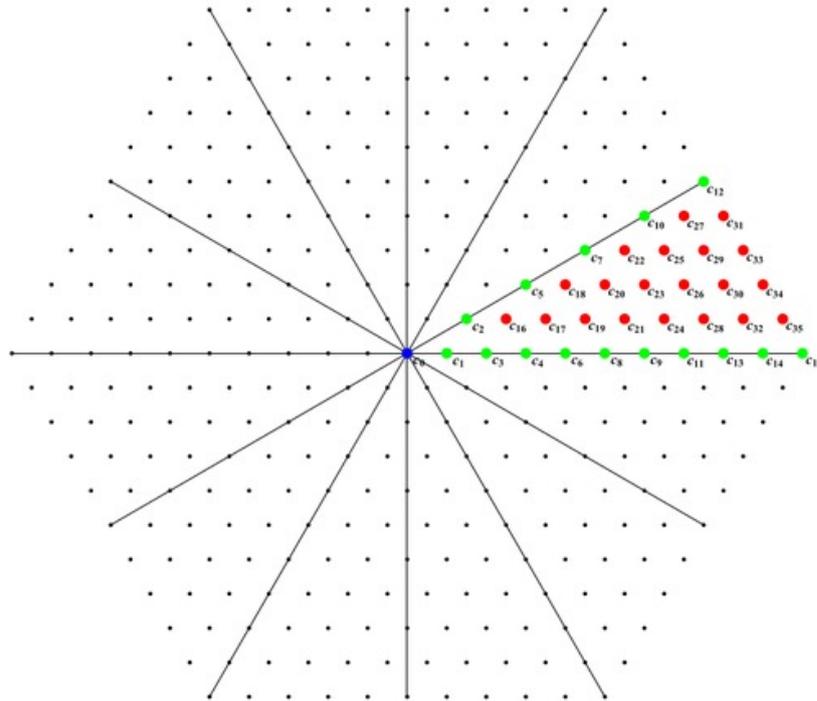
para o caso de faixas ao longo da direção  $y$ . Já para a solução de bolhas devemos ter

$$\vec{k}_i = k_o \vec{b}_i, \quad (2.32)$$

com  $\vec{b}_i$  definido de modo a estabelecer uma rede triangular com espaçamento de rede unitário. Além disso, considerando que o padrão regular tem todas as bolhas idênticas, as amplitudes de Fourier do parâmetro de ordem devem ser iguais para vetores de onda  $\vec{b}_i$  relacionados por operações de simetria do grupo de ponto da rede triangular.

Assim, escolhido o número máximo de modos  $n_{max}$  nas principais direções, fica estabelecido o número de amplitudes de Fourier que precisam ser consideradas. Em ambos os casos,  $k_o$  representa o vetor de onda de equilíbrio, que define o comprimento de modulação para cada uma das estruturas.

A figura 5 mostra o caso  $n_{max} = 10$ . Neste cenário, a configuração inicial envolveria amplitudes de Fourier relacionadas a 331 vetores  $\vec{b}_i$ . Considerando argumentos de simetria, apenas 35 amplitudes são independentes, mostrados nos pontos em destaque na figura. A figura ainda mos-



**Figura 5:** Rede de vetores de onda para um padrão de bolhas considerando  $n_{max} = 10$ . Cada ponto representa um vetor de onda diferente  $\vec{b}_i$  considerado para construir a solução.

tra que as amplitudes de Fourier independentes em questão podem ser discriminadas em grupos de modos, a partir da degenerescência que cada grupo apresenta em relação às componentes. O primeiro grupo, destacado em azul, consiste do modo zero, não degenerado. O segundo grupo é referente aos modos com orientação  $\theta = 0$  e  $\theta = \pi/6$ , tendo uma degenerescência 6. O terceiro grupo é composto por aqueles vetores com  $\theta \in (0, \pi/6)$ , com degenerescência 12.

Utilizamos a representação de Fourier (2.30) separadamente para os casos de faixas (2.31) e de bolhas (2.32), juntamente com (2.28) em (2.29), limitando as soluções a um máximo número de modos  $n_{max}$ , para efeitos de aplicação computacional. Assumindo, então, que os únicos estados de equilíbrio são os padrões de listras, bolhas ou uniforme, podemos construir diagramas de fases, determinando regiões onde energia livre é mínima para cada tipo de solução.

### 2.3.1 Cálculo da Temperatura Crítica

Fixando  $n_{max} = 1$  para a solução (2.30), temos que

$$\phi(\vec{x}) = c_0 + c_1 \cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{x}) \quad (2.33)$$

Podemos usar o caso de modo único para encontrarmos uma expressão para a temperatura crítica  $T_c$ , isto é, a temperatura para a qual, a campo externo zero, o sistema deixa de apresentar fases moduladas. Explicitamos aqui o procedimento utilizando a solução de faixas.

Para essa solução, temos que a Eq. (2.33) assume a forma

$$\phi_s(x) = c_0 + c_1 \cos(k_0 x). \quad (2.34)$$

Conforme comentamos anteriormente, como a solução  $\phi(x)$  assume valores muito pequenos próximo à temperatura crítica, podemos usar uma expansão em potências de  $\phi(x)$  para a entropia. Como a função da entropia é par, não temos coeficientes de potência ímpar. Mantendo termos até a quarta ordem, substituindo (2.34) em (2.29) e resolvendo para o padrão de faixas, chegamos à expressão para energia livre,

$$f_s(\phi_s) = \frac{1}{2}A'(0)c_0^2 + \frac{1}{4}A'(k_0)c_1^2 + k_B T \left( -\ln 2 + \frac{c_0^2}{2} + \frac{c_1^2}{4} + \frac{c_0^4}{12} + \frac{c_0^2 c_1^2}{4} + \frac{c_1^4}{32} \right). \quad (2.35)$$

A minimização se procede considerando como parâmetros livres  $c_0$ ,  $c_1$  e  $k_0$ . Encontrada a ex-

pressão para o caso do padrão de faixas, procuramos o mínimo global, resolvendo as equações

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_s}{\partial c_0} &= 0, \\ \frac{\partial f_s}{\partial c_1} &= 0, \\ \frac{\partial f_s}{\partial k_0} &= 0.\end{aligned}\tag{2.36}$$

A solução é, por conseguinte, o par de coeficientes de Fourier

$$\begin{aligned}c_0 &= 0, \\ c_1 &= 2\sqrt{\frac{1-T}{T}}.\end{aligned}\tag{2.37}$$

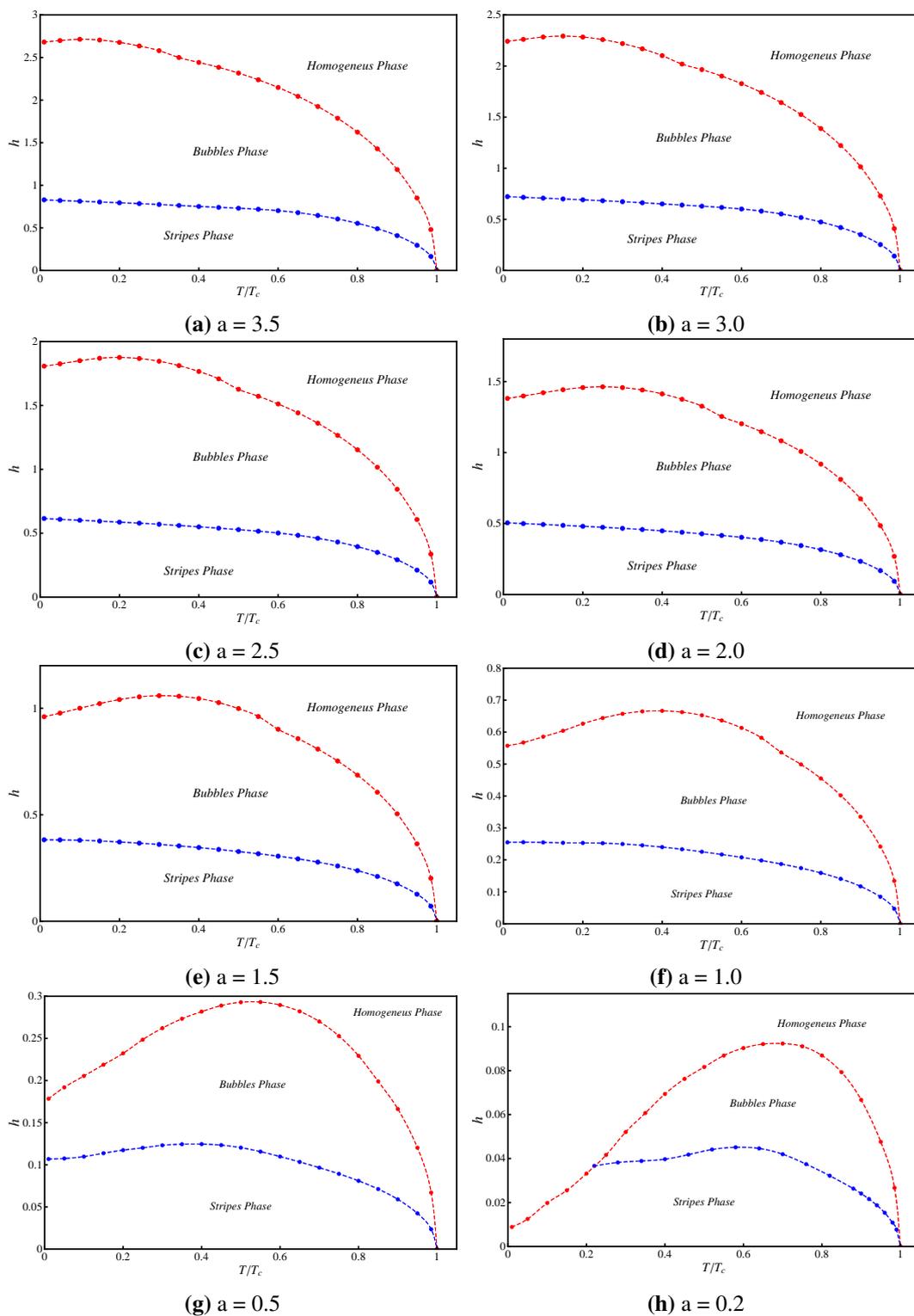
Finalmente, temos que a temperatura crítica é  $T_c = 1$ .

## 2.4 Diagramas de Fases

Nas figuras 6a até 6h, mostramos diagramas de fases, variando o campo magnético externo  $h$  e a temperatura  $T$  para oito diferentes curvaturas do espectro de excitações:  $a = 4.0, 3.5, 3.0, 2.5, 2.0, 1.5, 1.0, 0.5$ , e  $0.2$ , fixando o número máximo de modos  $n = 10$ . Como pode ser visto, os diagramas de fase têm características que variam de um caso para outro. Em todos os casos, três fases podem ser observadas: uma fase de faixas (*stripes*), uma fase de bolhas (*bubbles*), e a fase homogênea ou uniforme.

O valor da componente  $A(0)$  do espectro de flutuações em relação ao valor mínimo do espectro de flutuações determina o quanto o diagrama de fase apresenta de comportamento reentrante. As figuras mostram que, fixada uma baixa temperatura, o modelo passa por duas transições (exceto o caso  $a=0.2$ , figura 6h) à medida que a intensidade do campo é ampliada. Para pequenos valores de campo, a configuração de faixas é a fase de equilíbrio do modelo. No entanto, à medida que o campo aumenta e assume certa intensidade crítica, o padrão de faixas torna-se instável, dando lugar a uma solução de bolhas como configuração de equilíbrio para campos intermediários. Aumentando ainda mais o valor do campo, encontra-se um valor crítico no qual ocorre a transição para um estado paramagnético uniformemente magnetizado.

Curioso, no entanto, é o que acontece mantendo fixo o campo e diminuindo a temperatura, quando se observa a existência de transições inversas, isto é, a invariância espacial é restaurada com a redução da temperatura abaixo de uma região de estabilidade de uma fase modulada. Experimentos em filmes ferromagnéticos ultrafinos de Fe/Cu(001), com aplicação de campo

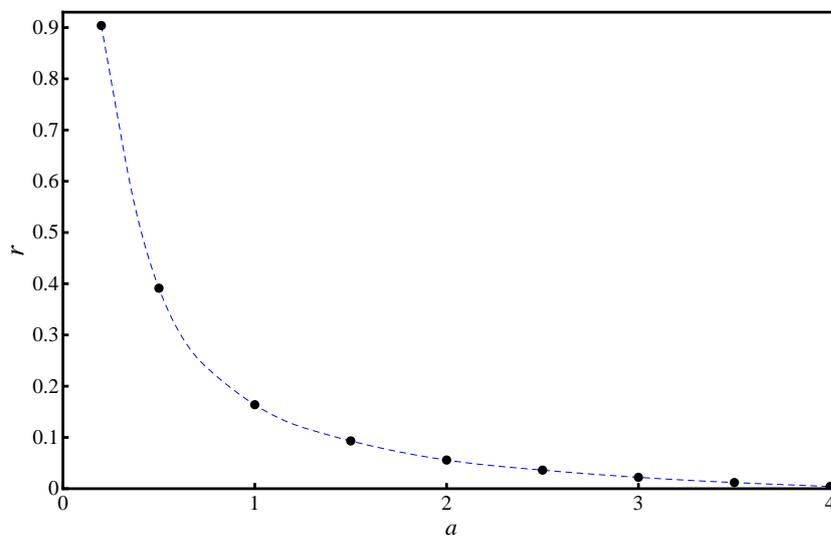


**Figura 6:** Diagramas de Fases  $h$  vs.  $T/T_c$  para  $a = 3.5, 3.0, 2.5, 2.0, 1.5, 1.0, 0.5$  e  $0.2$ . Os casos estão dispostos de forma decrescente, da esquerda para a direita, de cima para baixo. As linhas vermelhas e azuis indicam transições de primeira ordem.

magnético perpendicular, revelaram a existência dessas transições de quebra inversa de simetria, mostrando um comportamento reentrante nos diagramas de fase  $h-T$  (campo versus temperatura). Esse tipo de reentrância tem sido objeto de intensa investigação, buscando uma melhor compreensão das condições em que esse fenômeno ocorre e suas demais características.

Para melhor entendermos o comportamento reentrante, atentemos às funções termodinâmicas, no caso, a entropia e a energia livre, em função da temperatura. No caso  $a = 0.2$  em um campo externo  $h = 0.05$ , para o qual se observa uma fase de bolhas, vemos que as transições de fase resultam do balanço entre as contribuições energética e entrópica para a energia livre ( $F = E - TS$ ). Para temperaturas  $T < 0.55$ , tanto a energia como a entropia da fase de bolhas são maiores que as quantidades correspondentes na fase uniforme. A temperaturas ainda mais baixas, a influência da energia é mais forte e a fase uniforme é a mais estável. No ponto de quebra inversa de simetria ( $T = 0.3$ ) o balanço se inverte e a fase de bolhas se torna a fase estável. Dessa forma, o comportamento da entropia se torna crucial para o aparecimento de transições de quebra inversa de simetria.

Já na transição direta da fase de bolhas para a fase homogênea ( $T = 0.9$ ), os papéis desempenhados pela energia livre e pela entropia são trocados. A fase uniforme tem entropia e energia maiores que a de bolhas. No ponto de transição, o decréscimo na energia interna da fase uniforme contrabalança a maior entropia das bolhas. Comportamento similar é observado para valores mais altos,  $a = 4.0$ , em um regime de pouca reentrância. Nesse caso, a entropia da fase uniforme é maior que a de bolhas para todas as temperaturas, e a única quantidade termodinâmica relevante é a energia. Na referência [23] é sugerido que o excesso de entropia das paredes de domínio são responsáveis pelo comportamento reentrante observado no modelo de



**Figura 7:** Parâmetro de reentrância  $r$  em função da curvatura  $a$ .

Ising dipolar frustrado na fase de faixas. Aqui, confirmamos tal expectativa.

Podemos definir uma medida quantitativa da reentrância, definindo um parâmetro de reentrância  $r$  em termos dos valores do campo magnético crítico  $h(T)$ :

$$r = \frac{h_c^{max} - h_c(0)}{h_c^{max}}, \quad (2.38)$$

onde  $h_c^{max}$  é o maior valor para o campo crítico. Portanto, não existe reentrância quando  $h_c^{max} = h_c(0)$  e ela é máxima ( $r = 1$ ) quando  $h_c(0) = 0$ . Pelos diagramas de fase construídos, pode-se verificar que a reentrância está relacionada com a curvatura do espectro de flutuações, de modo que quanto menor for a curvatura maior será a reentrância apresentada pelo sistema no diagrama de fases. Esse comportamento é representado na Fig. 7.

---

# TRANSIÇÕES MEDIADAS POR DEFEITOS

---

## 3.1 Transições Mediadas por Defeitos Topológicos

Pelos diagramas de fase mostrados na Fig. 6, vemos que, nos sistemas aqui estudados, a configuração dominante na região de campos fracos é um padrão espacial de faixas no parâmetro de ordem. A presença de flutuações térmicas provoca o surgimento de *defeitos topológicos* nesse sistema de faixas. Tais defeitos são tipicamente configurações do parâmetro de ordem onde o campo de deformação do sistema apresenta uma singularidade localizada. Os tipos de defeitos que podem ocorrer em um sistema com um determinado padrão de ordenamento dependem da simetria espacial apresentada pelos padrões modulados.

Os defeitos considerados neste estudo serão *deslocações* e *disclinações*. Esses defeitos podem se desenvolver de forma isolada ou em pares conjugados, dependendo do custo energético de cada caso. Por exemplo, um dado tipo de defeito pode custar muita energia para existir isoladamente no sistema, enquanto que o par conjugado pode apresentar uma menor energia devido a que os campos de deformação mútuos dos defeitos conjugados anulam-se “rapidamente” em pontos distantes do par.

O aumento da temperatura provoca aumento no grau de desordem no sistema, favorecendo a criação de novos defeitos e aumentando a sua mobilidade. Desta forma, o aumento da temperatura pode causar transições de fases mediadas pela presença de defeitos. Quando esse tipo de transição acontece, o sistema perde a rigidez orientacional ou posicional, recuperando a simetria de rotação ou translação.

### 3.1.1 Descrição da Fase Nemática no Sistema de Faixas.

Até agora, a fase de faixas, que é a mais estável a campo fraco, foi visualizada como um ordenamento similar a uma estrutura cristalina, com ordem posicional e orientacional de longo alcance. Esse cenário é resultado do enfoque de campo médio empregado. A situação mais fiel à realidade é diferente, principalmente em duas dimensões, onde é sabido que as flutuações são

fortes o suficiente para destruir a ordem posicional e orientacional de longo alcance da fase de faixas perfeitamente ordenada.

Na situação realista, assim que a transição de fase acontece e as faixas aparecem, estas se encontram em um estado bastante desordenado, com um grande número de defeitos em movimento [17]. Nessas condições não há realmente quebra das simetrias de rotação ou de translação, caracterizando uma fase conhecida como “líquido de faixas”. A partir desse estado, a redução da temperatura e, conseqüentemente, da densidade e mobilidade dos defeitos leva a uma quebra da simetria de rotação no sistema. Essa quebra de simetria se reflete no fator de estrutura do parâmetro de ordem. O que se observa é o surgimento de dois máximos no fator de estrutura, que antes tinha um máximo degenerado sobre uma circunferência de raio  $k_0$  (comprimento médio das modulações). Essa fase sem ordem posicional, porém com a simetria rotacional quebrada, é chamada fase *nemática*.

Na fase nemática, as faixas têm seus eixos de simetria em torno de uma direção preferencial indicada pelos vetores diretores, isto é, os vetores associados à orientação das paredes de domínio (regiões onde o parâmetro de ordem muda de um sinal para outro) que definem o gradiente do parâmetro de ordem. A desordem posicional, no entanto, é mantida. Considerando esse cenário, é interessante encontrar uma forma efetiva do hamiltoniano total quando os padrões são deformados em relação à estrutura de faixas perfeitas.

As flutuações podem ocorrer de muitas formas diferentes. Todavia, sabemos que as flutuações de mais baixo custo energético são transversais. Sem perda de generalidade, assumiremos um perfil senoidal na direção  $x$ , como já fizemos anteriormente na construção das soluções, e permitiremos flutuações na fase da modulação via um campo de deformação  $u(\vec{x})$ , de forma que o parâmetro de ordem local seja dado por

$$\phi(\vec{x}) = c_o + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos(nk_0x + nk_0u(\vec{x})). \quad (3.1)$$

O campo de deformação  $u(\vec{x})$  mede o quanto a linha de nível que passaria pelo ponto  $\vec{x}$  está deslocada transversalmente. É evidente que no caso  $u(\vec{x}) = 0$  teríamos um sistema de faixas não deformadas (paralelas), conforme discutido no capítulo anterior.

Quando introduzimos flutuações na fase do parâmetro de ordem, é conveniente deduzir um hamiltoniano efetivo para o campo de deformação  $u(\vec{x})$ . Isso permitirá entender os efeitos das flutuações dominantes no sistema.

Para um funcional de energia livre da forma (2.29), os termos locais, ou seja, o termo de entropia e o termo Zeeman, não se alteram quando introduzimos o campo de deformação. O

único termo que se altera com as flutuações transversais é o termo referente às interações de troca e dipolar.

Considerando  $u(\vec{x})$  como uma pequena deformação, a transformada do parâmetro de ordem (3.1) é expressa como

$$\begin{aligned}\hat{\phi}(\vec{k}) &= \int d^2x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \left( c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos(nk_0x + nk_0u(\vec{x})) \right) \\ &= \int d^2x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \left( c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos(nk_0x) - \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin(nk_0x) nk_0u(\vec{x}) \right).\end{aligned}\quad (3.2)$$

Se definimos  $\Delta\hat{\phi}(\vec{k}) = \hat{\phi}(\vec{k}) - \hat{\phi}_0(\vec{k})$ , onde  $\hat{\phi}_0(\vec{k})$  representa a configuração não deformada e  $\hat{\phi}(\vec{k})$  é uma configuração geral, é possível escrever a energia de interação da configuração deformada como

$$\begin{aligned}H_{ef} &= \frac{1}{2} \int d^2\vec{k} \hat{A}'(\vec{k}) \hat{\phi}(\vec{k}) \hat{\phi}(-\vec{k}) \\ &= \frac{1}{2} \int d^2\vec{k} \hat{A}'(\vec{k}) \left( \hat{\phi}_0(\vec{k}) \cdot \hat{\phi}_0(-\vec{k}) + \hat{\phi}_0(\vec{k}) \cdot \Delta\hat{\phi}(-\vec{k}) \right. \\ &\quad \left. + \hat{\phi}_0(-\vec{k}) \cdot \Delta\hat{\phi}(\vec{k}) + \Delta\hat{\phi}(\vec{k}) \cdot \Delta\hat{\phi}(-\vec{k}) \right).\end{aligned}\quad (3.3)$$

A contribuição dos termos  $(\hat{\phi}_0(\vec{k}) \cdot \Delta\hat{\phi}(-\vec{k})) (\hat{\phi}_0(-\vec{k}) \cdot \Delta\hat{\phi}(\vec{k}))$  é subdominante em relação ao resto das contribuições devido a que  $\langle u(k) \rangle = 0$ , de modo que temos

$$H_{ef} = H_0 + \Delta H = H_0 + \frac{1}{2} \int d^2\vec{k} \hat{A}'(\vec{k}) \Delta\hat{\phi}(\vec{k}) \cdot \Delta\hat{\phi}(-\vec{k}),\quad (3.4)$$

onde  $H_0$  é o hamiltoniano de interação não perturbado. A expressão explícita para  $\Delta H$  é

$$\Delta H = -\frac{k_0^2}{8} \int d^2k \hat{A}'(\vec{k}) \sum_{n,m=1}^{\infty} \left[ nmc_n c_m (\hat{u}(\vec{k} - n\vec{k}_0) - \hat{u}(\vec{k} + n\vec{k}_0)) (\hat{u}(-\vec{k} - m\vec{k}_0) - \hat{u}(-\vec{k} + m\vec{k}_0)) \right]\quad (3.5)$$

Todas as contribuições produtos  $u(k \pm nk_0) u(-k \pm mk_0)$  com  $m \neq n$  são subdominantes pois o valor médio desses produtos é nulo. Assim, é possível concluir que o hamiltoniano efetivo será

$$\Delta H = \frac{1}{2} \int d^2\vec{k} \hat{B}(\vec{k}) \hat{u}(\vec{k}) \hat{u}(-\vec{k}),\quad (3.6)$$

onde

$$\hat{B}(\vec{k}) = \sum_n \left[ \frac{(c_n nk_0)^2}{4} (\hat{A}'(\vec{k} - n\vec{k}_0) + \hat{A}'(\vec{k} + n\vec{k}_0)) \right].\quad (3.7)$$

Considerando a estrutura da função  $B(k)$  e as condições que definem  $\vec{k}_0$ , é possível concluir que o modo de mais baixa energia das flutuações da fase é o modo de  $k = 0$ . Fazendo uma ex-

pansão em longos comprimentos de onda, e tendo em conta que os valores de  $c_n$  e  $k_0$  são aqueles da configuração de faixas que minimiza a energia livre, é possível verificar numericamente que  $B(\vec{k})$  sempre assume a forma

$$B(\vec{k}) = b(k_x^2 + \lambda^2 k_y^4), \quad (3.8)$$

onde  $b$  e  $b\lambda^2$  caracterizam o custo energético de uma flutuação de compressão e dobramento das faixas, respectivamente. Como podemos observar pela forma de  $B(\vec{k})$ , flutuações transversais de longos comprimentos de onda custam uma energia muito menor que aquelas na direção das faixas. A partir da forma obtida para  $B(\vec{k})$  é possível mostrar que a flutuação quadrática média do campo de deformação,  $\langle u^2 \rangle$ , diverge no limite termodinâmico. Isso significa que as flutuações transversais destroem a ordem posicional de longo alcance no sistema.

Outra propriedade topológica relevante no nosso caso seria a ordem orientacional do sistema. Ela pode ser caracterizada a partir do campo de orientação das faixas,  $\theta(\vec{x})$ , que mede o ângulo entre o vetor diretor das faixas e um eixo de referência, normalmente escolhido perpendicular à direção de orientação média das faixas. Se calcularmos a flutuação orientacional média das faixas dentro da presente aproximação de pequenas deformações, é possível mostrar que tal quantidade permanece finita no limite termodinâmico. Isso significa que as flutuações transversais não são fortes o suficiente para destruir a ordem orientacional de longo alcance.

O cenário obtido considerando unicamente pequenas flutuações transversais é incompleto, como mostra a teoria clássica da fusão de fases topológicas [11, 24]. No caso em análise, os defeitos topológicos conhecidos como deslocamentos têm um papel central no enfraquecimento da ordem orientacional. Uma vez considerado o efeito de deslocamentos no campo de orientação das faixas  $\theta(\vec{x})$ , o hamiltoniano “microscópico” orientacional tem a forma [24]

$$\Delta H = \frac{1}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left( 2E_d \frac{a^2}{d^2} k_x^2 + b\lambda^2 k_y^2 \right) \hat{\theta}(\vec{k}) \hat{\theta}(-\vec{k}), \quad (3.9)$$

onde  $E_d$  representa a mínima energia permitida para uma deslocamento,  $d$  é o comprimento de modulação das faixas e  $a$  representa o “cut-off” de distâncias curtas para o sistema. No nosso caso, é natural escolher  $a = d$ , pois não tem sentido considerar variações do campo de orientação das faixas em distâncias menores que o próprio comprimento de uma faixa. Por simplicidade da notação, definimos

$$\begin{aligned} k_1 &\equiv b\lambda^2, \\ k_2 &\equiv 2E_d. \end{aligned} \quad (3.10)$$

A energia de uma deslocamento pode ser calculada a partir da forma assumida pelo campo de deformação na presença desse defeito [25]. O resultado final desse cálculo mostra que a energia

de uma deslocação pode ser estimada como sendo

$$E_d = \frac{b\lambda^{1/2}d^{3/2}}{2^{3/2}\sqrt{\pi}}. \quad (3.11)$$

Usando técnicas de Grupo de Renormalização, mostra-se [24] que o presente modelo perde o seu carácter anisotrópico para longas distâncias, de forma que o valor assintótico da rigidez orientacional ( $k_\infty$ ) é dado por

$$k_\infty = \frac{k_1 + k_2}{2}. \quad (3.12)$$

Desta forma, o hamiltoniano efetivo que descreve as propriedades orientacionais do sistema de faixas para longos comprimentos de onda passa a ser

$$\Delta H = \frac{1}{2} \int d^2x k_\infty (\vec{\nabla}\theta)^2. \quad (3.13)$$

O hamiltoniano obtido é o do bem conhecido modelo  $XY$ , já muito estudado na literatura [26]. O modelo apresenta uma transição entre uma fase crítica, com ordem orientacional de quase longo alcance, e uma fase desordenada, com ordem de orientacional de curto alcance. Tal transição é mediada pela presença de defeitos topológicos, conhecidos como vórtices no caso do modelo  $XY$ . Tais vórtices são equivalentes às conhecidas disclinações no sistema de faixas. Assim como os vórtices no modelo  $XY$ , as disclinações no sistema de faixas custam muita energia para existir isoladamente. No entanto, a sua existência em forma de pares conjugados é possível. Portanto, a ordem orientacional no sistema é destruída pela proliferação e aumento da mobilidade de tais pares de defeitos com o aumento da temperatura.

As equações do grupo de renormalização que caracterizam tal transição são bem conhecidas, e permitem calcular a rigidez efetiva do modelo e a fugacidade (efetiva) dos defeitos. As equações do fluxo de renormalização para o modelo são [27].

$$\begin{aligned} \frac{d\kappa}{dl} &= -4\pi^3 \kappa^2(l) y^2(l) \\ \frac{dy}{dl} &= (2 - \pi\kappa(l))y(l), \end{aligned} \quad (3.14)$$

sujeitas às condições iniciais

$$\begin{aligned} \kappa(0) &= \frac{k_\infty}{k_B T}, \\ y(0) &= e^{-E_c/k_B T}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde  $E_c$  é a energia dos defeitos, que pode ser estimada calculando a energia mínima associada à existência de um par de disclinações. Como a energia desses defeitos é muito elevada para eles existirem de forma isolada, e pela forma em que esse parâmetro é introduzido nos cálculos

do Grupo de Renormalização, pode-se interpretar essa quantidade como a metade da energia de um par de disclinações conjugadas na configuração em que a energia do par é a mínima possível. Tal cálculo permite chegar ao resultado

$$E_c = k_\infty \pi [\gamma - \text{Ci}(\pi) + \ln(\pi)], \quad (3.16)$$

onde  $\gamma$  é a constante de Euler e  $\text{Ci}(x)$  é a integral cosseno.

É possível identificar quando estamos na presença da fase nemática devido a que, nesse caso, o valor efetivo da rigidez orientacional é positivo ( $\kappa(+\infty) > 0$ ). Consequentemente, se  $\kappa(+\infty) = 0$  estaremos em um ponto do espaço de parâmetros onde as faixas encontram-se orientacionalmente desordenadas. Desta forma é possível fazer a caracterização topológica completa da “fase” de faixas, distinguindo-a entre *fase nemática*, na qual o sistema possui rigidez orientacional não nula e, portanto, possui ordem orientacional de quase longo alcance, e o *líquido de faixas*, fase na qual as faixas somente apresentam ordem posicional e orientacional **local**.

### 3.1.2 Descrição da Fase Esmética do Sistema de Bolhas

Semelhante ao que acontece para faixas, nosso sistema também poderia apresentar transições de fases topológicas mediadas por defeitos na região de configurações de bolhas. Tal conclusão baseia-se em resultados de trabalhos experimentais e simulações numéricas [28, 29]. Em determinadas condições de campo externo e temperatura, o sistema de bolhas poderia quebrar as simetrias frente a traslações e rotações, estruturando-se em uma fase análoga a uma fase sólida. Essa fase é conhecida na literatura como *fase esmética*, e é caracterizada por possuir ordem posicional de quase longo alcance e orientacional de longo alcance.

A evolução das propriedades topológicas dessa estrutura de bolhas com o aumento da temperatura é usualmente descrita teoricamente pela teoria K.T.H.N.Y., também conhecida como teoria clássica do “melting”. Como mostrado em uma série de trabalhos pioneiros [13, 30, 11, 24], à medida que a temperatura do sistema aumenta, defeitos topológicos do tipo deslocações (Fig. (2a)) começam a proliferar no sistema, promovendo cada vez mais desordem. Eventualmente, a simetria frente a traslações é restaurada via uma transição de fase com características similares a uma transição Kosterlitz-Thouless (KT). É digno de nota que a ordem orientacional não é perdida nessa transição, passando o sistema de uma fase com ordem orientacional de longo alcance a uma fase com ordem orientacional de quase longo alcance.

Nessas condições o sistema encontra-se em outra fase, denominada *fase hexática*. Tal fase é

caracterizada pela presença de ordem posicional de curto alcance e orientacional de quase longo alcance, como mencionado anteriormente. A partir desse estado, o aumento da temperatura produz a proliferação de uma nova classe de defeitos topológicos: as disclinações (Fig. (2b)). O aumento na densidade desses defeitos promove a perda da ordem orientacional, promovendo, assim, uma transição KT a uma fase topologicamente desordenada, similar a um líquido, na qual tanto a ordem posicional quanto a orientacional existem só localmente.

Para que possamos descrever as possíveis transições esmética e hexática, precisamos considerar flutuações de baixo custo energético no padrão de bolhas. Como sabemos, a solução em ausência de flutuações neste caso será

$$\phi(\vec{x}) = c_0 + \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cos(k_0 \vec{b}_i \cdot \vec{x}). \quad (3.17)$$

Para introduzir flutuações nessa solução é necessário permitir que cada componente de Fourier da solução flutue na sua fase. Porém, é natural assumir que as flutuações de menor energia são aquelas que perturbam o padrão sem destruir as próprias bolhas. Esse fato pode ser traduzido matematicamente impondo a condição de que na solução perturbada o centro das bolhas continue a ter o mesmo valor de saturação do parâmetro de ordem que tinha no caso não deformado.

A partir desse vínculo, é possível mostrar que a forma apropriada de introduzir flutuações na solução de bolhas é considerar

$$\phi(\vec{x}) = c_0 + \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cos(k_0 \vec{b}_i \cdot \vec{x} + k_0 \vec{b}_i \cdot \vec{u}(\vec{x})), \quad (3.18)$$

onde  $\vec{u}(\vec{x})$  representa o campo de deformação das bolhas, agora bidimensional. Pode ser mostrado de forma simples que na presença de deformações ( $\vec{u}(\vec{x}) \neq \vec{0}$ ) o deslocamento de uma bolha em relação à sua posição de equilíbrio,  $\vec{x}_0$ , deve ser  $-\vec{u}(\vec{x}_0)$ .

Procedendo de forma análoga ao que foi feito no caso das faixas, obtemos que o hamiltoniano elástico para o sistema de bolhas é dado pela expressão

$$\begin{aligned} \Delta H &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_n \frac{c_n^2 k_0^2 (b_n^x)^2}{4} [\hat{A}'(\vec{k} + k_0 \vec{b}_n) + \hat{A}'(\vec{k} - k_0 \vec{b}_n)] \hat{u}_x(\vec{k}) \hat{u}_x(-\vec{k}) \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_n \frac{c_n^2 k_0^2 2b_n^x b_n^y}{4} [\hat{A}'(\vec{k} + k_0 \vec{b}_n) + \hat{A}'(\vec{k} - k_0 \vec{b}_n)] \hat{u}_x(\vec{k}) \hat{u}_y(-\vec{k}) \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_n \frac{c_n^2 k_0^2 (b_n^y)^2}{4} [\hat{A}'(\vec{k} + k_0 \vec{b}_n) + \hat{A}'(\vec{k} - k_0 \vec{b}_n)] \hat{u}_y(\vec{k}) \hat{u}_y(-\vec{k}). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Considerando agora o limite de longos comprimentos de onda,  $k \rightarrow 0$ , e que os valores de  $c_n$  e  $k_0$  são aqueles obtidos como resultado do processo de minimização, pode-se concluir, pelos

resultados da análise numérica, que o hamiltoniano efetivo no limite em questão tem a forma

$$\begin{aligned}\Delta H &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} ((2\mu + \lambda)k_x^2 + \mu k_y^2) \hat{u}_x(\vec{k}) \hat{u}_x(-\vec{k}) \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} ((2\mu + \lambda)k_y^2 + \mu k_x^2) \hat{u}_y(\vec{k}) \hat{u}_y(-\vec{k}) \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} ((2\mu + 2\lambda)k_x k_y) \hat{u}_x(\vec{k}) \hat{u}_y(-\vec{k}).\end{aligned}\quad (3.20)$$

Essa forma do hamiltoniano efetivo é interessante porque mostra a equivalência entre as propriedades elásticas do sistema de bolhas no contínuo e aquelas de um cristal bidimensional triangular de partículas localizadas [31]. Os parâmetros  $\lambda$  e  $\mu$  são conhecidos como coeficientes de Lamé, sendo justamente esses parâmetros os que caracterizam a resposta elástica do sistema.

Dada a forma do hamiltoniano efetivo, é natural descrever as propriedades topológicas do sistema usando resultados conhecidos da literatura [24, 11] para a fusão de sistemas de partículas em duas dimensões. Como discutido nas referências citadas, a fusão da fase esmética pode ser detectada monitorando o valor efetivo da constante elástica,

$$K_0 = \frac{4\mu(\mu + \lambda)a_0^2}{2\mu + \lambda}, \quad (3.21)$$

onde  $a_0$  representa o parâmetro de rede do sistema triangular de bolhas. Tal quantidade pode ser calculada em termos do vetor de onda básico da rede de bolhas. É fácil mostrar que  $a_0 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}k_0}$ .

As equações do grupo de renormalização que descrevem a fusão da fase esmética [30] são

$$\begin{aligned}\frac{d\kappa}{dl} &= -\kappa^2(l) \left[ \frac{3}{2} \pi y^2(l) e^{\frac{\kappa(l)}{8\pi}} I_0 \left( \frac{\kappa(l)}{8\pi} \right) - \frac{3}{4} \pi y^2(l) e^{\frac{\kappa(l)}{8\pi}} I_1 \left( \frac{\kappa(l)}{8\pi} \right) \right], \\ \frac{dy}{dl} &= \left( 2 - \frac{\kappa(l)}{8\pi} \right) y(l) + 2\pi y^2(l) e^{\frac{\kappa(l)}{16\pi}} I_0 \left( \frac{\kappa(l)}{8\pi} \right),\end{aligned}\quad (3.22)$$

onde

$$\begin{aligned}\kappa(0) &= \frac{K_0}{k_B T}, \\ y(0) &= e^{-\frac{E_d}{k_B T}}.\end{aligned}\quad (3.23)$$

Analogamente às equações que descrevem a transição nemática,  $E_c$  representa a energia dos defeitos topológicos relevantes para a transição. Neste caso, essa energia pode ser estimada como metade da energia mínima de um par de deslocções, levando em conta que deslocções

isoladas são energeticamente proibitivas. Tal procedimento permite concluir que

$$E_d = \frac{K_0}{8\pi} [\gamma - \text{Ci}(\pi) + \ln(\pi)]. \quad (3.24)$$

Mais uma vez, podemos usar o valor efetivo da constante de rigidez  $\kappa(+\infty)$  para determinar quando estamos na fronteira da fase esmética. Uma vez nessa fronteira, um aumento da temperatura normalmente produz a transição a uma fase que possui ordem posicional de curto alcance e ordem orientacional de quase longo alcance. Como explicado anteriormente, tal fase recebe o nome de fase hexática. A próxima seção é dedicada à revisão das principais propriedades da fase hexática, com o objetivo de possibilitar a identificação das regiões do diagrama de fases correspondente a tal fase.

### 3.1.3 Transição Hexática

Na fase hexática, o sistema apresenta simetria translacional, porém apresenta ainda ordem orientacional de quase longo alcance. Nessas condições, como discutido anteriormente, um aumento da temperatura produz eventualmente uma transição a uma fase na qual finalmente a ordem orientacional de quase longo alcance é perdida. Dessa forma, a nova fase “desordenada” apresenta ordem posicional e orientacional só localmente. Tal transição de fase, segundo a teoria K.T.H.N.Y., é muito similar àquela que acontece no modelo XY em duas dimensões, sendo o hamiltoniano efetivo do sistema, nesse caso,

$$\Delta H = \frac{k_A}{2} \int d^2x (\vec{\nabla}\theta)^2, \quad (3.25)$$

onde  $k_A$  é conhecida na literatura como constante efetiva de Frank [11, 24, 30]. A variável  $\theta(\vec{x})$  caracteriza a orientação das ligações entre partículas vizinhas próximas em relação a uma direção preferencial. De forma geral, em regiões com comprimento característico da ordem do comprimento de correlação posicional ( $\xi_p$ ) o campo de orientação  $\theta(\vec{x})$  não possui variações significativas.

A constante de Frank [24] pode ser calculada como

$$k_A = 2E_d \left( \frac{\xi_p}{a_0} \right)^2, \quad (3.26)$$

onde  $E_d$  é dada pela Eq. (3.24) e  $(\xi_p/a_0)$ , no contexto do Grupo de Renormalização, pode ser calculado como  $\exp(l^*)$  onde  $l^*$  é o “tempo” para integrar as equações de fluxo de renormalização (3.22) até atingir o estado estacionário.

Assim, é possível determinar numericamente o valor da constante de Frank, o qual permitirá

determinar as fronteiras da fase hexática. Com esse objetivo, escrevemos agora as equações do Grupo de Renormalização para o nosso modelo:

$$\begin{aligned}\frac{d\kappa}{dl} &= -4\pi^3 \kappa^2(l)y^2(l), \\ \frac{dy}{dl} &= (2 - \pi\kappa(l))y(l),\end{aligned}\tag{3.27}$$

onde  $\kappa(l) = k_A(l)/(k_B T)$  representa a rigidez renormalizada em unidades de  $k_B T$ . O sistema de equações anterior deve ser suplementado com o conjunto de condições iniciais

$$\begin{aligned}\kappa(0) &= \frac{k_A}{k_B T}, \\ y(0) &= e^{-E_D/k_B T},\end{aligned}\tag{3.28}$$

onde  $E_D$  representa a energia dos defeitos topológicos relevantes na transição hexática. Embora o hamiltoniano efetivo e, portanto, as equações do fluxo de renormalização neste caso possuam a mesma forma que aqueles do modelo  $XY$ , o sistema em estudo possui um conjunto de simetrias diferente daquele modelo. Isso tem como consequência que os defeitos topológicos admissíveis sejam diferentes. No presente caso, os defeitos topológicos relevantes são as chamadas disclinações, como mencionado anteriormente. De acordo com nossos cálculos anteriores, a energia de tais defeitos pode ser estimada como

$$E_D = \frac{k_A}{36}\pi[\gamma - \text{Ci}(\pi) + \ln(\pi)].\tag{3.29}$$

A solução do conjunto de equações do Grupo de Renormalização anteriormente apresentada permitiria determinar a rigidez orientacional efetiva ( $\kappa(+\infty)$ ). Essa quantidade serve como parâmetro para identificar quando a transição da fase hexática para a fase líquida acontece.

## 3.2 Diagramas com Fases Topológicas

Nas figuras 8a até 8h, fixando  $n_{max} = 10$  mostramos diagramas de fase de campo magnético ( $h$ ) versus temperatura ( $T/T_c$ ) para oito casos representativos:  $a = 3.5, 3.0, 2.5, 2.0, 1.5, 1.0, 0.5,$  e  $0.2$ . Em todos os casos são observadas seis fases termodinâmicas: a fase nemática de faixas, a fase líquida de faixas, a fase esmética de bolhas, a fase hexática de bolhas, a fase líquida de bolhas e a fase homogênea.

Como pode ser visto, a estrutura dos diagramas de fases apresenta diferenças significativas. Isso é denotado bem claramente pela diferença na extensão das regiões de reentrância e no aspecto das curvas que demarcam as transições de fases. O valor do parâmetro de curvatura

do espectro de flutuações está intimamente relacionado à reentrância também nas fases topológicas, mais especificamente, quanto maior é o valor da curvatura, menores são as regiões de reentrância apresentadas pelo sistema.

O valor do espectro de flutuações em  $k = 0$  em relação ao seu valor em  $k_{min}$  determina a extensão da região das reentrâncias observadas nos diagramas (8a) a (8h). Os diagramas mostram que, fixado um baixo valor de campo externo (situando-se na região da solução de faixas), partindo de baixas temperaturas para mais altas, como regra geral o modelo passa por uma transição topológica em que o sistema recupera simetria rotacional, o líquido de faixas. Em todos os diagramas, exceto o caso  $a = 0.2$  (Fig: 8h), o sistema pode sofrer transição de fase de primeira ordem da fase nemática diretamente para a configuração de bolhas, a campo fixo, sem passar pela fase de líquido de faixas, seja para um líquido de bolhas, para a fase hexática, ou até mesmo para a fase esmética de bolhas (salvo ainda o caso  $a = 0.5$ , (Fig: 8g). Para maiores valores de campo, situando-se na região na qual a configuração mais estável é a de bolhas, partindo de baixas temperaturas, nota-se que o sistema possui tanto ordem posicional de quase longo alcance, quanto orientacional de longo alcance, encontrando-se portanto em sua fase esmética. À medida que a temperatura aumenta e assume valores intermediários, pares de deslocamentos começam proliferar-se e a desvincular-se, promovendo ao sistema ganho de simetria translacional. Como visto na seção 3, a separação dos pares dessa espécie de defeitos não consegue quebrar completamente a ordem orientacional. O resultado no diagrama é, portanto, uma região intermediária, onde o sistema possui simetria posicional e ordem orientacional de quase longo alcance. Essa fase topológica é a fase hexática, esboçada nos diagramas abaixo (Figs 8a a 8h). Finalmente, para temperaturas mais altas, próximas à  $T_c$ , a proliferação, maior mobilidade e desvinculação de pares de disclinações devido ao aumento da temperatura, é responsável pela perda da ordem orientacional de quase longo alcance, resultando no líquido de bolhas. Assim como ocorre para a configuração de faixas, para certos regimes de temperatura, tanto a fase esmética de bolhas quanto a hexática de bolhas, podem sofrer transições de primeira ordem, a campo fixo, para a fase não modulada.

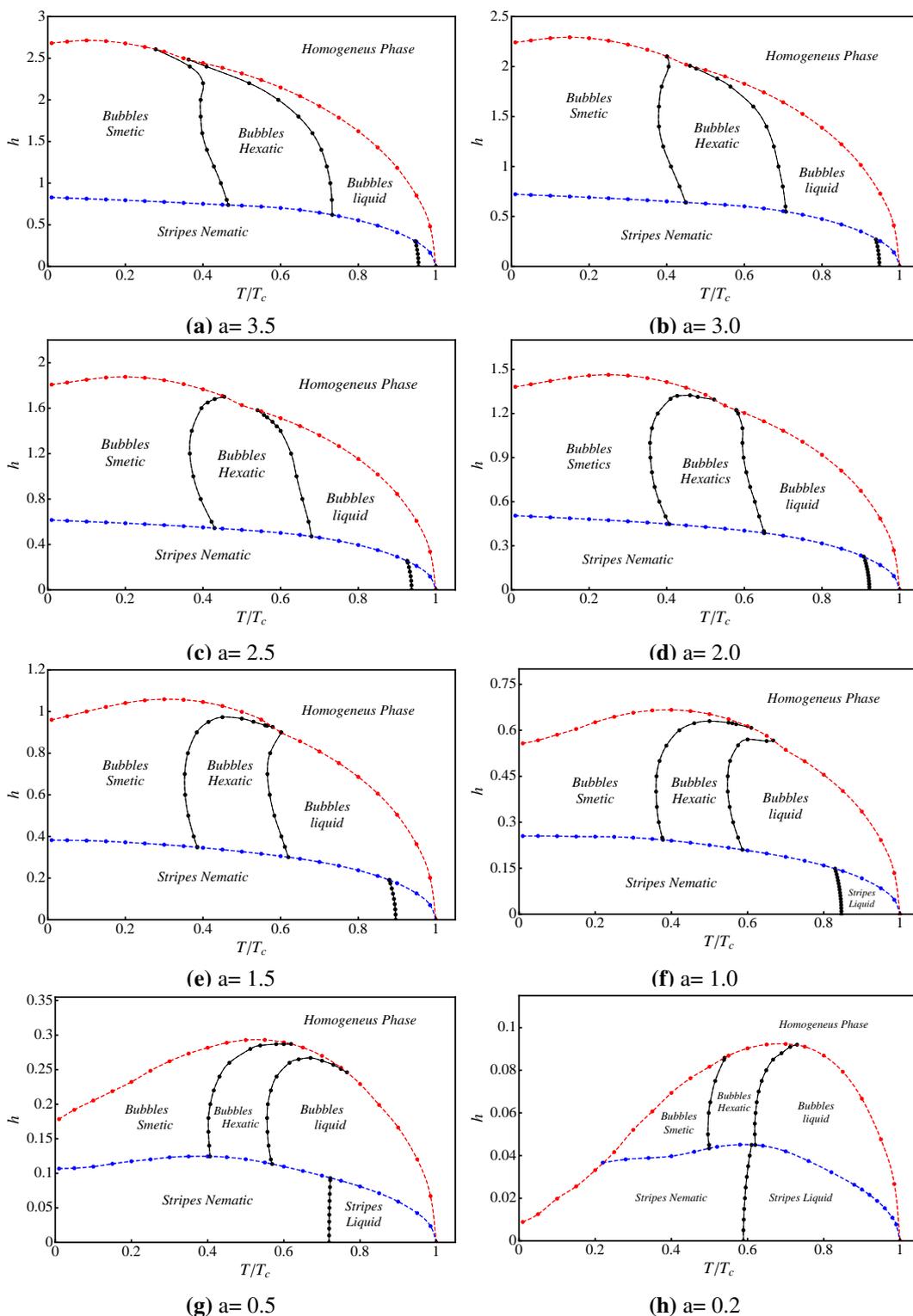
A reentrância aqui se comporta de modo ainda mais interessante. Com a diminuição de  $A(0)$ , as curvas que separam uma fase topológica de outra, sofrem flexões cada vez maiores até comportarem regiões de reentrância onde transições inversas de fases topológicas também passam a ocorrer.

Assim, além de reentrâncias de temperatura (isto é, reentrâncias observadas no diagrama, quando, fixando um valor para o campo externo, partindo de baixas temperaturas, permite-se aumentar a temperatura do sistema e chegar a fases mais moduladas ou ordenadas), reentrâncias

de campo (fixando a temperatura e aumentando o campo) são também observadas. Um exemplo disso é o caso da figura (8g) ( $a = 0.5$ ). Na região de temperatura por onde a curva que separa a fase esmética de bolhas e a fase hexática, o sistema passa por quatro transições de fase com o aumento do campo, respectivamente: transição da fase nemática de faixas para fase esmética de bolhas, transição da fase esmética de bolhas para a fase hexática, transição da fase hexática de bolhas para a fase esmética e, por fim, transição da fase esmética para a fase uniforme. Além de duas dessas transições serem de caráter topológico, percebe-se que a segunda transição topológica apresentada pelo diagrama em questão (Hexática-Esmética) ( $a=0.5$ , 8g) é resultado de uma reentrância de campo, isso pois, aumentando-se o valor do campo o sistema recupera ordem posicional. Esse fenômeno é contraitutivo justamente por não se esperar a recuperação de ordem pelo sistema com um aumento da intensidade do campo externo.

A reentrância em campo também pode ser vista para o caso de faixas, nos diagramas (8g) e (8h),  $a = 0.5$  e  $a = 0.2$ , respectivamente. Nesses dois diagramas, fixando a temperatura próxima a curva que separa as fases nemática da líquida, aumentando a intensidade do campo, transições inversas ocorrem em que o sistema torna a apresentar ordem orientacional, recuperando simetria rotacional.

Simulações e estudos sugerem de um crossover na região delimitada pela curva que demarca a transição da fase de bolhas para a fase homogênea, de forma que, regiões próximas fora da região delimitada pela linha em vermelho nos diagramas ainda sejam moduladas, porém com o comprimento de correlação menor que o comprimento de modulação. Considerando isso, para pequenos valores de curvatura, o sistema apresenta transições ainda mais interessantes, não somente pelo fato de apresentar um comportamento reentrante entre essa fase do líquido modulado e a fase esmética, mas por essa transição ser de primeira ordem, fato esse, assim como a reentrância em si, que foge às considerações da teoria K.T.H.N.Y..



**Figura 8:** Diagramas de fases  $h$  vs.  $T/T_c$  para  $a = 3.5, 3.0, 2.5, 2.0, 1.5, 1.0, 0.5$  e  $0.2$ . Os casos estão dispostos de forma decrescente, da esquerda para a direita, de cima para baixo. As linhas vermelhas e azuis correspondem a transições de primeira ordem, enquanto as pretas indicam transições do tipo KT.

---

## CONCLUSÕES

---

Apresentamos um modelo para a formação de estruturas moduladas inspirado em sistemas magnéticos (como filmes magnéticos), considerando a competição de uma interação ferromagnética de curto alcance com uma interação dipolar de longo alcance. Em uma aproximação de campo médio, a expressão para o funcional da energia livre do sistema foi explicitada e diagramas de fase  $h$ - $T$  puderam ser construídos.

Vários diagramas de fases foram então obtidos para diferentes valores de curvatura de um espectro de flutuações de formato parabólico (Figs. 6a à 6h). Determinando como soluções possíveis padrões modulados de faixas e bolhas [2, 22], observou-se que a curvatura do espectro de flutuações determina a existência ou não de transições inversas. Notou-se que, para maiores valores dessa curvatura menor é a extensão das regiões de reentrância, corroborando expectativa levantada por Velasque *et. al* [23]. Este resultado é também consistente com resultados obtidos por simulações de Monte Carlo [32, 33]. Os diagramas de fase mostram topologia semelhante à observada experimentalmente em filmes magnéticos [28, 29].

Por meio do estudo do melting bidimensional, desenvolvido por Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson e Young [13, 30, 11, 24], e através de técnicas de DFT (Teoria do Funcional de Densidade) e grupo de renormalização, consideramos os efeitos da proliferação e desvinculação de pares de defeitos topológicos (deslocações e disclinações) devido ao aumento da temperatura do sistema. No caso de deslocações, isso leva à quebra da ordem posicional, promovendo a transição de fases entre a fase esmética e a fase hexática. Por sua vez, as disclinações dão conta da quebra da ordem orientacional de quase longo alcance, ainda não completamente quebrada pelas deslocações a temperaturas intermediárias. Novos diagramas de fases foram construídos incluindo transições de fases mediadas por esses defeitos topológicos.

Não só a existência de novas fases devido à topologia do sistema foi abordada (fase nemática de faixas, líquido de faixas, fase esmética de bolhas, fase hexática de bolhas e líquido de bolhas), como também novas reentrâncias foram observadas. O fenômeno da reentrância observada nos diagramas é interessante não só por ser contraintuitivo, mas também por não estar previsto pela teoria K.T.H.N.Y., elaborada antes da observação experimental das transições

inversas [28, 29]. É interessante ressaltar que nos sistemas em estudo essas transições inversas são de primeira ordem.

As reentrâncias notadas nos diagramas com e sem fases topológicas apresentaram comportamento semelhante quanto ao papel da curvatura do espectro de flutuações. A redução dessa curvatura favorece o aparecimento de transições inversas. Isso ocorre também sob variação de campo magnético no caso de fases topológicas, em transições do tipo KT (entre fases esmética e hexática de bolhas) ou estritamente KT (entre fases nemática e líquida de faixas).

Este trabalho aponta para novas perspectivas de investigação, incluindo a busca de comprovação experimental das tendências e informações apresentadas ao longo deste estudo em relação a reentrâncias e transições inversas, através da construção experimental de diagramas de fases, possivelmente em filmes magnéticos ultrafinos.

---

## Referências Bibliográficas

---

- [1] A. D. McNaught and A. Wilkinson. Compendium of chemical terminology, 2007.
- [2] Michael Seul and David Andelman. Domain shapes and patterns: The phenomenology of modulated phases. *Science*, 267(5197):476–483, 1995.
- [3] M. Seul, L. R. Monar, L. O’Gorman, and R. Wolfe. Morphology and local structure in labyrinthine stripe domain phase. *Science*, 254(5038):1616–1618, 1991.
- [4] O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia. An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films. *Nature*, 422(6933):701–704, Apr 2003.
- [5] Gianpietro Malescio and Giuseppe Pellicane. Stripe patterns in two-dimensional systems with core-corona molecular architecture. *Phys. Rev. E*, 70:021202, Aug 2004.
- [6] A. Imperio and L. Reatto. Microphase separation in two-dimensional systems with competing interactions. *The Journal of Chemical Physics*, 124(16):164712, 2006.
- [7] N. Osterman, D. Babič, I. Poberaj, J. Dobnikar, and P. Ziherl. Observation of condensed phases of quasiplanar core-softened colloids. *Phys. Rev. Lett.*, 99:248301, Dec 2007.
- [8] M. A. Glaser, G. M. Grason, R. D. Kamien, A. Košmrlj, C. D. Santangelo, and P. Ziherl. Soft spheres make more mesophases. *EPL (Europhysics Letters)*, 78(4):46004, 2007.
- [9] Sergio A. Cannas, Daniel A. Stariolo, and Francisco A. Tamarit. Stripe-tetragonal first-order phase transition in ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B*, 69:092409, Mar 2004.
- [10] Lucas Nicolao and Daniel A. Stariolo. Langevin simulations of a model for ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B*, 76:054453, Aug 2007.
- [11] David R. Nelson and B. I. Halperin. Dislocation-mediated melting in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 19:2457–2484, Mar 1979.
- [12] Antara Pal, Md Arif Kamal, and V. A. Raghunathan. Observation of the chiral and achi-ral hexatic phases of self-assembled micellar polymers. *Sci Rep*, 6:32313, Aug 2016. 27577927[pmid].
- [13] J M Kosterlitz and D J Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(7):1181, 1973.
- [14] Erez Berg, Eduardo Fradkin, Steven A Kivelson, and John M Tranquada. Striped superconductors: how spin, charge and superconducting orders intertwine in the cuprates. *New Journal of Physics*, 11(11):115004, 2009.

- [15] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 1995.
- [16] W. L. Bragg and E. J. Williams. The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys. ii. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 151(874):540–566, 1935.
- [17] S. A. Brazovskii. Phase transition of an isotropic system to a nonuniform state. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1975.
- [18] Daniel G. Barci and Daniel A. Stariolo. Competing interactions, the renormalization group, and the isotropic-nematic phase transition. *Phys. Rev. Lett.*, 98:200604, May 2007.
- [19] Sergio A. Cannas, Marianela Carubelli, Orlando V. Billoni, and Daniel A. Stariolo. Inverse transition in a two-dimensional dipolar frustrated ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 84:014404, Jul 2011.
- [20] O. Portmann, A. Gölzer, N. Saratz, O. V. Billoni, D. Pescia, and A. Vindigni. Scaling hypothesis for modulated systems. *Phys. Rev. B*, 82:184409, Nov 2010.
- [21] Alejandro Mendoza-Coto, Orlando V. Billoni, Sergio A. Cannas, and Daniel A. Stariolo. Modulated systems in external fields: Conditions for the presence of reentrant phase diagrams. *Phys. Rev. B*, 94:054404, Aug 2016.
- [22] T. Garel and S. Doniach. Phase transitions with spontaneous modulation—the dipolar ising ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 26:325–329, Jul 1982.
- [23] Luciana Araújo Velasque, Daniel A. Stariolo, and Orlando V. Billoni. Inverse transition in the dipolar frustrated ising ferromagnet: The role of domain walls. *Phys. Rev. B*, 90:214408, Dec 2014.
- [24] John Toner and David R. Nelson. Smectic, cholesteric, and rayleigh-benard order in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 23:316–334, Jan 1981.
- [25] A. B. Kashuba and V. L. Pokrovsky. Stripe domain structures in a thin ferromagnetic film. *Phys. Rev. B*, 48:10335–10344, Oct 1993.
- [26] P. G. Maier and F. Schwabl. Ferromagnetic ordering in the two-dimensional dipolar  $xy$  model. *Phys. Rev. B*, 70:134430, Oct 2004.
- [27] Mehran Kardar. *Statistical Physics of Fields*. Cambridge University Press, 2007.
- [28] N. Saratz, A. Lichtenberger, O. Portmann, U. Ramsperger, A. Vindigni, and D. Pescia. Experimental phase diagram of perpendicularly magnetized ultrathin ferromagnetic films. *Phys. Rev. Lett.*, 104:077203, Feb 2010.
- [29] N. Saratz, U. Ramsperger, A. Vindigni, and D. Pescia. Irreversibility, reversibility, and thermal equilibrium in domain patterns of fe films with perpendicular magnetization. *Phys. Rev. B*, 82:184416, Nov 2010.
- [30] B. I. Halperin and David R. Nelson. Theory of two-dimensional melting. *Phys. Rev. Lett.*, 41:519–519, Aug 1978.

- 
- [31] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, A.M. Kosevich, and L.P. Pitaevskiĭ. *Theory of Elasticity*. Course of theoretical physics. Butterworth-Heinemann, 1986.
- [32] Sergio A. Cannas, Marianela Carubelli, Orlando V. Billoni, and Daniel A. Stariolo. Inverse transition in a two-dimensional dipolar frustrated ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 84:014404, Jul 2011.
- [33] Rogelio Díaz-Méndez and Roberto Mulet.  $H-T$ . *Phys. Rev. B*, 81:184420, May 2010.