

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**Fases de equilíbrio em filmes ferromagnéticos
dipolares com anisotropia perpendicular [†]**

Luciana Araújo Velasque

Tese realizada sob a orientação do Dr. Daniel Adrián Stariolo e apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutora em Ciências.

Porto Alegre
Dezembro de 2014

[†]Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Àqueles que me conduziram desde sempre, meus pais
e a quem escolhi para seguirmos juntos, Maicon.

Agradecimentos

- ✓ Ao meu orientador, Daniel A. Stariolo, pela dedicação demonstrada, pelo apoio, compreensão e paciência nos momentos difíceis e, acima de tudo, pela amizade durante o período de trabalho.
- ✓ Ao professor Orlando V. Billoni, da Universidad Nacional de Córdoba, pela gentil colaboração ao nosso trabalho.
- ✓ Ao meus pais, Arnaldo e Maria Elizabeth, pelo amor incondicional, apoio, compreensão e incentivo permanentes.
- ✓ Ao meu esposo, Maicon, por seu constante apoio e incentivo.
- ✓ Aos colegas do PPGFis, pelo convívio durante estes anos.
- ✓ Aos professores e funcionários do IF, que de alguma forma contribuíram para a minha formação e para a realização deste trabalho.

RESUMO

Neste trabalho estudamos um ferromagneto de Ising em uma rede bidimensional. Consideramos fases espacialmente anisotrópicas em um modelo de Ising dipolar frustrado na presença de um campo externo, em uma aproximação de campo médio e também em outros dois modelos com configurações mais simples das paredes de domínio.

Em um primeiro momento, foi estudado o modelo de Ising em uma rede quadrada, no qual há a competição entre a interação de troca, a qual favorece um estado uniforme, e a interação dipolar, que favorece a presença de domínios. Os domínios de equilíbrio observados têm a estrutura de listras ou faixas simétricas, quebrando a isotropia espacial do sistema.

Na segunda parte do estudo, é adicionado ao sistema um campo magnético externo, o qual é homogêneo; este campo favorece uma orientação preferencial das faixas, gerando um padrão de modulação de faixas assimétricas. Este campo externo está também em competição com a interação dipolar, favorecendo o estado uniforme.

Experimentos recentes [1, 2] mostram uma transição de fases inversa uniforme-modulada-uniforme, a medida que se diminui a temperatura para um campo externo fixo. Resultados analíticos em um modelo de Ginzburg-Landau [3] mostram a curva reentrante campo vs. temperatura, perto do ponto crítico, onde o modelo é válido.

No estudo a campo nulo, analisamos o comportamento do sistema com o aumento da intensidade relativa entre os parâmetros de interação de troca e dipolar δ . Observamos que, para grandes valores de δ , o sistema apresenta uma grande metaestabilidade e o período de modulação das faixas cresce fortemente próximo à transição. Na região de δ grande, o semi-período da modulação h obedece à relação $h(\delta) \sim e^{\delta/2}$, de acordo com estudos realizados em [4].

No estudo com campo externo, através de uma análise numérica, mostramos que os graus de liberdade internos das paredes de domínio são essenciais para a presença da transição inversa. Também mostramos que em um modelo com paredes estreitas não é observada a reentrância (transição inversa).

Em altas temperaturas os graus de liberdade adicionais do modelo de campo médio aumentam a entropia do sistema, reduzindo a energia livre. Em temperaturas baixas as paredes de domínio tornam-se mais estreitas e com os correspondentes graus de liberdade congelados, o que, eventualmente, induz a transição inversa para a fase homogênea. Mostramos também que, aumentando o campo magnético a uma temperatura constante, a largura da faixa aumenta muito rapidamente ao aproximar-se da linha de campo crítico, e diverge na transição.

Nosso objetivo é obter o diagrama de fases para o modelo de Ising deste sistema, e explicar a origem da transição inversa observada em filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular.

ABSTRACT

In this work we study a Ising ferromagnet on a two-dimensional lattice. We consider spatially anisotropic phases in a dipolar frustrated Ising model in an external field in a mean field approximation and also in two other models with a simpler configuration of the domain walls.

At first, was studied the Ising model on a square lattice, in which there is the competition between the exchange interaction, which favors a uniform state, and the dipolar interaction, which favors the presence of domains. The equilibrium domains have the structure of symmetric stripes or bands, breaking the isotropy of the system.

In the second part of the study, it is added to the system an external magnetic field, which is homogeneous; this field favors a preferential orientation of stripes, generating a modulation pattern of asymmetric bands. This external field is also in competition with the dipolar interaction, favoring the uniform state.

Recent experiments [1, 2] show an inverse phase transition uniform-modulated-uniform, as the temperature is reduced at fixed external field. Analytical results in a Ginzburg-Landau model [3] show the reentrant curve field vs. temperature, near the critical point, where the model is valid.

In the zero field case, we analyzed the system behavior with growing values of the parameter δ , which measures the relative intensity between the exchange and dipolar interactions. We observe that, for large values of δ , the system displays a large metastability and the modulation period of stripes grows strongly near the transition. In the region of large δ , the half-period of modulation h , follows the relation $h(\delta) \sim e^{\delta/2}$, according to studies conducted in [4].

At finite external field we show, by a numerical analysis of the mean field equations, that the internal degrees of freedom of the domain walls are essential for the presence of the inverse symmetry breaking transition. We also show that in a model with narrow walls the reentrance (inverse transition) is not observed.

At high temperatures the additional degrees of freedom of mean-field model increase the entropy of the system, reducing the free energy of the stripe phase. At low temperatures the domain walls becomes narrower and the corresponding degrees of freedom frozen, which eventually induces an inverse transition to the homogenous phase. We also show that, for growing external field at constant temperature, the stripe width grows strongly when approaching the critical field line, and diverges at the transition.

Our goal is to obtain the phase diagram for the Ising model on this system, and explain the origin of the inverse symmetry breaking transition observed in ultrathin magnetic films with perpendicular anisotropy.

Índice

1	Introdução	1
2	O Modelo	9
2.1	Motivação	9
2.2	A aproximação de campo médio	10
2.3	Energia livre de campo médio do modelo de Ising dipolar	11
3	Diagrama de fases de campo médio	13
3.1	Soluções a campo nulo: equações de estado	13
3.2	Soluções com campo externo: equações de estado	22
3.2.1	Diagrama de fases	27
3.2.2	Análise das energias	30
4	A transição inversa	39
4.1	Modelos	40
4.1.1	Sharp-wall	40
4.1.2	Two-spin-wall	40
4.2	Resultados: o papel das paredes de domínio	43
4.2.1	Largura das faixas e assimetria	43
4.2.2	Diagrama de fases	45
4.2.3	Análise da energia livre	48
5	Conclusões	52

A	Energia livre variacional de campo médio	55
B	Simulated Annealing	57
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	61

Relação de Figuras

1.1	Evolução de domínios magnéticos com o aumento da temperatura em um ferromagneto de Heisenberg com anisotropia perpendicular e interações dipolares através de simulação Monte Carlo.	2
1.2	Estrutura de bolhas formadas em um sistema com interações de troca e dipolares atuantes, na presença de um campo externo, obtidas em uma simulação de Langevin.	3
1.3	Diagrama de fases de Ginzburg-Landau de [5].	4
1.4	Estudo experimental em $Fe/Cu(100)$ através de microscopia SEMPA. (a) \rightarrow (e) $H = 146\mu T$. (f) \rightarrow (j) $T = 350K$ ($T/T_c = 0.99$)[1].	5
1.5	Estudo experimental em $Fe/Cu(001)$ através de microscopia SEMPA. $H = 156\mu T$ [2].	6
1.6	Diagrama de fases esquemático para o plano H-T. Em (a) para valores positivos de Δ_g e, em (b) para valores negativos do mesmo.	7
1.7	Resultados analíticos em um modelo de Ginzburg-Landau de [3] mostrando a curva reentrante no plano campo <i>vs</i> temperatura. U \rightarrow fase uniforme, S \rightarrow faixas e B \rightarrow bolhas.	8
3.1	Variação na largura das listras com a temperatura para diferentes valores de δ	17
3.2	Variação da largura de equilíbrio das listras em função dos valores de δ entre 2 e 10 para $T = 0$ em escala log-linear em (a). Temperatura de transição para $2 \leq \delta \leq 10$ em (b).	18

3.3	Mudança no perfil da magnetização com a temperatura para $h = 10$ e $\delta = 10$. $\tau = 0.99, 0.22, 0.06$ e 5×10^{-4} respectivamente.	18
3.4	Contorno do padrão modulado de faixas para $h = 10$ e $\delta = 10$ modificado pela temperatura.	19
3.5	Linhas tracejadas são linhas de estabilidade para a solução de listras de Campo Médio. Linha cheia é a linha de transição.	20
3.6	Valores do h de equilíbrio para temperaturas fixas a $\delta = 10$	20
3.7	Mudança no perfil da magnetização com o aumento do campo externo a uma temperatura fixa para $\delta = 6.0$	24
3.8	Largura das faixas λ (asteriscos pretos), componente positiva da magnetização λ^+ (triângulos vermelhos) e a assimetria λ^- (círculos azuis) em função do campo magnético para $T = 2$. Inset: fits de acordo com previsões analíticas da referência [6].	25
3.9	Diagrama de fases campo <i>versus</i> temperatura para $\delta = 6.0$	27
3.10	Diagrama $T \times$ <i>Energia livre</i> para $\delta = 6.0$, para um campo magnético fixo $H = 0.3$. Linha tracejada são os valores de energia para o padrão de faixas e a linha cheia relativa a fase ferromagnética.	30
3.11	Diagrama $T \times$ <i>Energia</i> e $T \times$ <i>Entropia</i> respectivamente, para $\delta = 6.0$ e $H = 0.3$. Linha tracejada são os valores de energia para o padrão de faixas e a linha cheia relativa a fase ferromagnética.	31
3.12	Gráfico da magnetização em função da temperatura para $H = 0.3$	32
3.13	Diagrama $T \times$ <i>Energia livre</i> para $\delta = 6.0$, para um campo magnético fixo $H = 0.4$. Linha tracejada são os valores de energia para o padrão de faixas e a linha cheia relativa a fase ferromagnética.	33
3.14	Zoom no gráfico 3.13 para explicitar os cruzamentos das energias.	34
3.15	Diagrama $T \times$ <i>Energia livre</i> para $\delta = 6.0$, para um campo magnético fixo $H = 0.4$, para três valores fixos de h e solução ferro.	34
3.16	Diagrama $T \times$ <i>Energia</i> para $\delta = 6.0$ e $H = 0.4$	35

3.17	Diagrama $Entropia \times T$ para $\delta = 6.0$ e $H = 0.4$	36
3.18	Gráfico da magnetização em função da temperatura para $H = 0.4$	37
4.1	Perfil da magnetização dos três modelos estudados. As amplitudes foram deslocadas para ilustrar melhor a forma de cada perfil.	41
4.2	Modelo sharp-wall: Largura das faixas λ (asteriscos pretos), componentes positivos da magnetização λ^+ (triângulos vermelhos) e assimetria λ^- em função do campo magnético H , para $T = 2$ à esquerda e $T = 10$ à direita.	43
4.3	Modelo two-spin-wall: Largura das faixas λ (asteriscos pretos), componentes positivos da magnetização λ^+ (triângulos vermelhos) e assimetria λ^- em função do campo magnético H , para $T = 2$ à esquerda e $T = 10$ à direita.	45
4.4	Diagrama de fases campo <i>versus</i> temperatura para os três modelos estudados para $\delta = 6.0$	46
4.5	Energia livre (a), energia (b), entropia (c) e magnetização (d) em função do campo magnético aplicado em $T = 2.0$	50
4.6	Energia livre (a), energia (b), entropia (c) e magnetização (d) em função do campo magnético aplicado em $T = 10.0$	51
B.1	Comando utilizado para minimização da energia livre do padrão de faixas assimétricas.	58

Capítulo 1

Introdução

Materiais magnéticos são amplamente estudados em diferentes áreas da ciência, tanto teórica como experimentalmente.

Em muitos destes sistemas, observam-se fases de equilíbrio que apresentam uma magnetização inhomogênea espacialmente. Estas inhomogeneidades estão associadas a uma quebra de simetria translacional ou rotacional (ou ambas) no sistema, devido a instabilidades estruturais que levam ao aparecimento de domínios em que a magnetização apresenta um comportamento complexo.

A modulação do parâmetro de ordem e a consequente formação de domínios magnéticos, aparece como resultado da competição entre interações com diferentes tendências, atuando em diferentes escalas de comprimento no sistema. Em geral, tem-se uma interação forte mas com curto alcance, a qual tende a ordenar uniformemente o sistema, e uma interação fraca, mas com longo alcance, que tende a frustrar este ordenamento. O que ocorre então, é que não é possível encontrar uma configuração que minimize ambas as energias, assim o sistema se quebra em domínios, arranjando-se em diferentes estados até atingir o estado de equilíbrio. Deste modo, para a formação de domínios não homogêneos, independem os tipos de interação atuantes, o que importa é o caráter competitivo entre elas.

Por exemplo, em sistemas magnéticos [5], a competição entre a interação de troca de curto alcance, que favorece um alinhamento paralelo dos spins e a interação dipolar de longo alcance, que favorece um alinhamento antiparalelo, faz com que o sistema se quebre

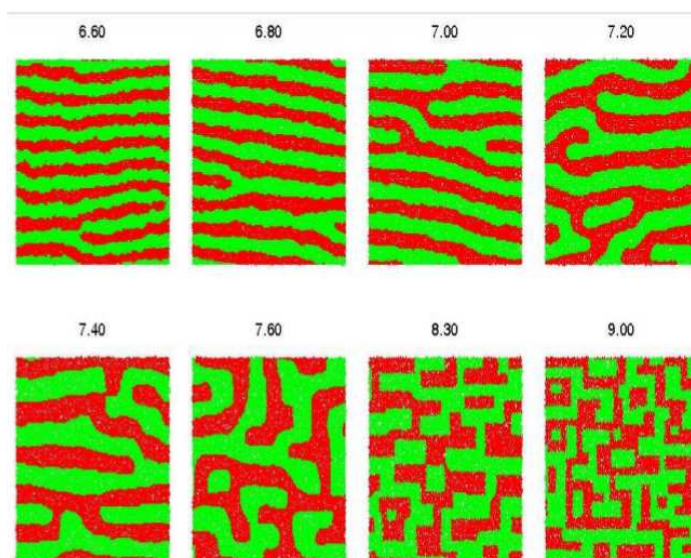


Figura 1.1: *Evolução de domínios magnéticos com o aumento da temperatura em um ferromagneto de Heisenberg com anisotropia perpendicular e interações dipolares através de simulação Monte Carlo.*

em domínios magnéticos do parâmetro de ordem. Nestes casos, o parâmetro de ordem é a magnetização do sistema e, este mede o grau de alinhamento dos momentos magnéticos (spins).

Em duas dimensões, algumas das fases morfologicamente bem definidas que frequentemente são observadas na análise de tais sistemas, são as fases de faixas e de bolhas. A temperaturas suficientemente altas, esta ordem é eventualmente perdida.

A figura 1.1, mostra a evolução da formação de estruturas de faixas com o aumento da temperatura em um estudo realizado em simulação Monte Carlo. A ordem posicional observada nestes sistemas significa que as correlações são invariantes frente a translações na rede. E, na fileira superior da figura, é observada também ordem orientacional, a qual é uma invariância frente a rotações espaciais.

O padrão de faixas quebra a invariância rotacional do sistema e pode gerar uma fase

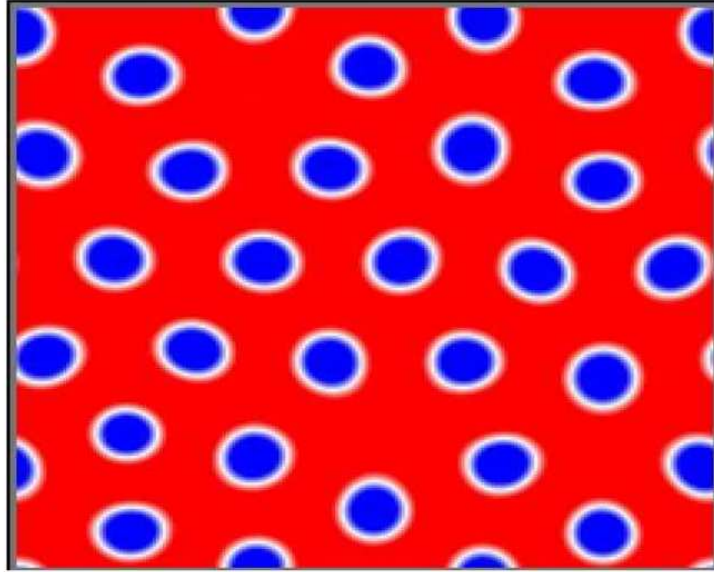


Figura 1.2: *Estrutura de bolhas formadas em um sistema com interações de troca e dipolares atuantes, na presença de um campo externo, obtidas em uma simulação de Langevin.*

nemática, a qual é caracterizada por apresentar ordem orientacional mas não posicional e, as correlações espaciais decaem exponencialmente com a distância.

Com a introdução de um campo externo no sistema a simetria do padrão de faixas observado é quebrada pois este favorece uma direção preferencial do alinhamento das faixas e outras formações estruturais podem ser observadas, o que pode levar a uma significativa mudança no diagrama de fases. Outra estrutura frequentemente encontrada com a adição de um campo externo homogêneo é a fase de bolhas (mostrada na figura 1.2), que é observada além da fase de listras (faixas) já observada sem o campo externo.

Um grande número de modelos têm sido estudados com o intuito de explicar as peculiaridades observadas em sistemas em duas dimensões. Alguns modelos potencializam a importância de defeitos topológicos e predizem a ocorrência de estados intermediários e transições de segunda ordem, outros sugerem uma transição direta de primeira ordem a um estado desordenado de alta temperatura, entretanto, evidências experimentais ainda

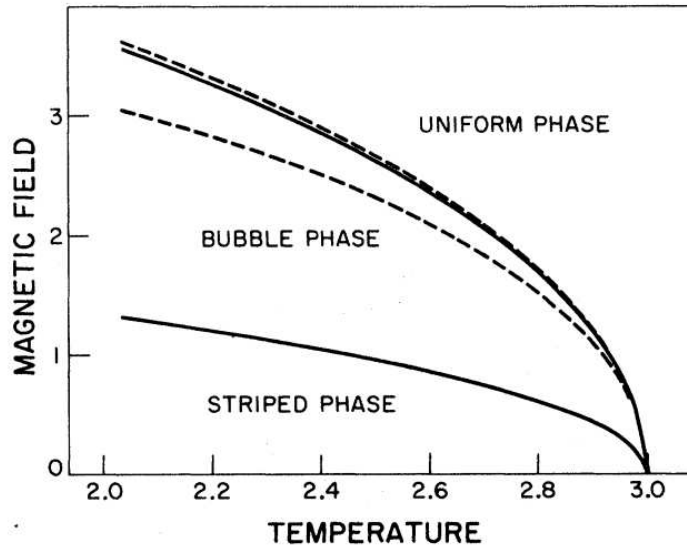


Figura 1.3: Diagrama de fases de Ginzburg-Landau de [5].

são raras na literatura.

Em 1982, Garel e Doniach [5] realizaram um estudo teórico em um ferromagneto de Ising dipolar na aproximação de Ginzburg-Landau e, no diagrama de fases campo-temperatura, observaram uma sequência de fases de faixas, bolhas e uniforme, apresentando sucessivamente menor energia livre com o aumento do campo magnético como mostrado na figura 1.3, nela as linhas cheias são os limites de cada fase e as linhas tracejadas são os campos críticos. Estudos em simulação de Monte Carlo de um modelo de Ising-dipolar [7], também apresentam este comportamento.

Recentemente, estudos experimentais em filmes magnéticos ultrafinos [1, 2] e teóricos em um ferromagneto dipolar [3] e uma hipótese de escala para sistemas modulados proposta por Portmann *et al.* [8], contestam esta imagem do diagrama de fases.

Experimentalmente, é observada uma transição inversa analisando o sistema a campo fixo e aumentando a temperatura. Observa-se uma sequência de fases uniforme-modulada-uniforme no diagrama $H - T$. Em [1], ao se resfriar uma amostra de $Fe/Cu(100)$ a

campo magnético fixo, a fase de bolhas aparece em um intervalo muito pequeno a altas temperaturas antes da saturação. Na figura 1.4, nas imagens entre (a) e (e) a amostra é resfriada mantendo o campo magnético fixo em $H = 146\mu T$, entre (f) e (j), a temperatura é mantida fixa em $T = 350K$ e o campo magnético é aumentado a partir de zero.

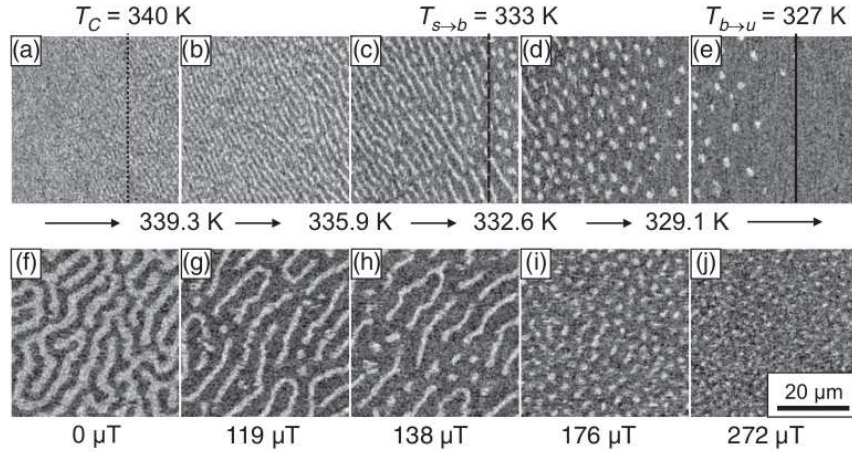


Figura 1.4: Estudo experimental em $Fe/Cu(100)$ através de microscopia SEMPA. (a) \rightarrow (e) $H = 146\mu T$. (f) \rightarrow (j) $T = 350K$ ($T/T_c = 0.99$)[1].

Em [2] os autores observaram que ao aquecer ($T = 332.5K \rightarrow 335.5K$) uma amostra de $Fe/Cu(001)$ a um campo magnético constante esta, inicialmente saturada, transita para um estado de equilíbrio com o padrão de faixas, figura 1.5 (a) \rightarrow (b). Nas imagens (c) \rightarrow (h) a temperatura é mantida em $T = 336.5K$, a amostra é relaxada e as flutuações térmicas fazem com que o domínio de faixas se quebre em vários domínios menores, até que em (h) é observado apenas um domínio de bolhas.

Em [8], o campo externo crítico (onde ocorre a transição entre as fases modulada e uniforme) é proporcional à razão entre a magnetização de saturação dentro do domínio, a qual é praticamente constante a baixas temperaturas, e o comprimento de modulação a campo zero, que inicialmente diminui rapidamente e, próximo a temperatura crítica,

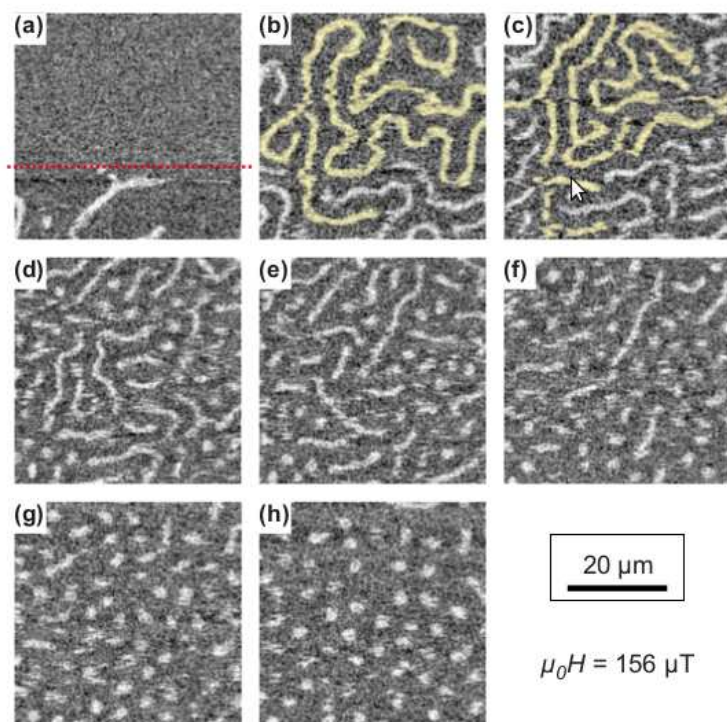


Figura 1.5: Estudo experimental em $Fe/Cu(001)$ através de microscopia SEMPA. $H = 156\mu T$ [2].

decrece mais lentamente que a magnetização de saturação. Com isto, eles observaram um diagrama de fases exibindo uma forma de cúpula, contradizendo o comportamento monotônico observado em [5]. A figura 1.6 é uma visão esquemática para o diagrama de fases apresentado pelos autores. Nela são apresentados os diagramas usando-se, em (a) $\Delta_g > 0$ e, em (b) $\Delta_g < 0$, onde $\Delta_g = d - \alpha$ é um expoente de escala discutido em [8], com d a dimensão do sistema e α o expoente da interação de longo alcance.

Em [3], foi observado que o diagrama de fases de campo médio de um ferromagneto bidimensional em um campo externo, mostra uma transição inversa entre uma fase modulada e um fase paramagnética, como mostra a figura 1.7 apresentada pelos autores. Nesta figura é possível observar, que ao reduzirmos a temperatura mantendo fixo o campo externo,

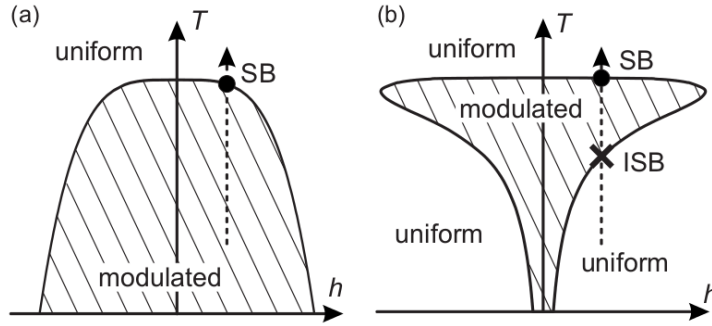


Figura 1.6: Diagrama de fases esquemático para o plano H - T . Em (a) para valores positivos de Δ_g e, em (b) para valores negativos do mesmo.

vemos claramente uma transição uniforme-modulada-uniforme.

Neste trabalho, estamos particularmente interessados em analisar as propriedades físicas de um ferromagneto bidimensional de Ising frustrado por interações dipolares. As interações dipolares frustram o sistema pois não é encontrada uma configuração que minimize a energia de troca ferromagnética de Ising e a energia dipolar; como consequência o sistema se organiza em estados que apresentam uma modulação no parâmetro de ordem até atingir seu estado de equilíbrio.

Neste modelo bidimensional, os momentos magnéticos dos spins apontam na direção perpendicular ao plano e, sem a adição de um campo magnético externo, estes formam um padrão modulado em que os spins se alinham em faixas de magnetizações com sinais opostos, este é o padrão de estabilidade do sistema em baixas temperaturas. Adicionando um campo externo ao sistema, é gerada uma direção preferencial de alinhamento dos spins, isto leva a perda de simetria do padrão de faixas anteriormente observado a campo nulo e, em alguma região do diagrama de fases, é possível observar o aparecimento de uma fase com estruturas circulares (bolhas).

O trabalho está dividido da seguinte forma. No capítulo 2 será feita uma breve introdução sobre as aplicações possíveis, em diferentes áreas, com o domínio no entendimento

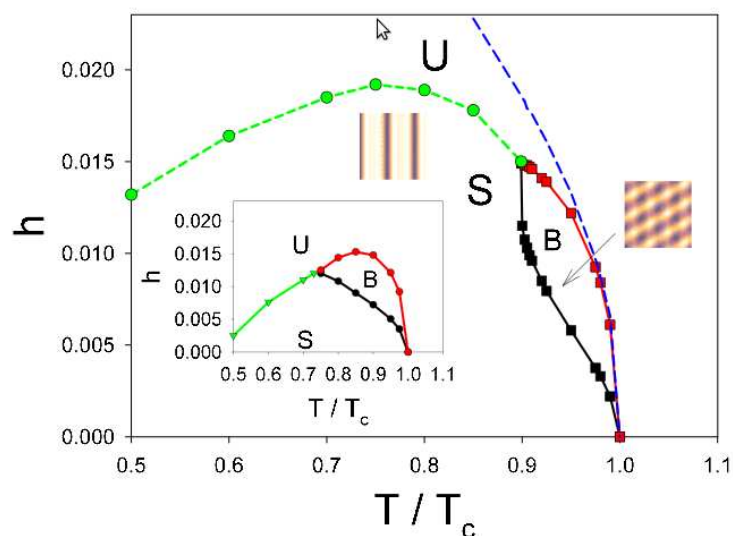


Figura 1.7: Resultados analíticos em um modelo de Ginzburg-Landau de [3] mostrando a curva reentrante no plano campo vs temperatura. $U \rightarrow$ fase uniforme, $S \rightarrow$ faixas e $B \rightarrow$ bolhas.

deste tipo de sistemas. Também será introduzido o modelo obtido através da aproximação de campo médio.

No capítulo 3 são apresentadas as soluções para o modelo, obtendo-se as equações de estado para este, sem a adição de campo externo e, posteriormente, com a adição de um campo externo H homogêneo. Neste capítulo também é realizada uma discussão dos resultados obtidos, analisando o sistema como um todo e como se comporta o diagrama de fases com as diferentes fases observadas em nossa análise. No capítulo 4, apresentaremos dois modelos mais simplificados no que diz respeito à estrutura das paredes de domínio e faremos uma comparação com o modelo de campo médio. No capítulo 5 são apresentadas as conclusões sobre o trabalho realizado.

Capítulo 2

O Modelo

2.1 Motivação

Muitos sistemas físicos exibem padrões complexos abaixo de T_c . Estes padrões são originados devido à competição de interações em diferentes escalas, isto é observado desde sistemas de estado sólido até filmes magnéticos ultrafinos [9, 10, 11], sistemas fortemente correlacionados [12, 13] e sistemas de matéria condensada mole [14, 15, 16, 17]. O estudo destes materiais é de grande interesse nos campos da física, química e biologia, não apenas pela riqueza fenomenológica de suas propriedades, mas também pela grande importância comercial de tais materiais. Por exemplo, a partir de investigações nesta área, foram possíveis várias inovações tecnológicas como transistores, microprocessadores, circuitos integrados, entre outros.

A presença de estruturas em filmes magnéticos ultrafinos, por exemplo, tem grande importância em aplicações a memórias de computador, assim como a presença de padrões semelhantes em sistemas fortemente correlacionados pode nos mostrar a base do comportamento dos supercondutores de alta temperatura crítica [18].

Para que no futuro possamos fazer uso destes sistemas com aplicações em diversas áreas da ciência, é necessário que possamos entender e controlar o comportamento das interações que levam à formação espontânea destas estruturas. Experimentalmente, já é possível produzir sistemas auto-organizados [19]. Por outro lado, o entendimento teórico da grande

diversidade de fases complexas encontradas nestes sistemas e como se dá a formação destas, ainda é um desafio.

Tais estruturas são observadas tanto em sistemas clássicos de matéria condensada mole, como exemplo copolímeros dibloco e colóides, quanto em sistemas quânticos, como exemplo os filmes magnéticos. Isto pode indicar a presença de uma classe de universalidade.

Nosso objetivo geral neste trabalho é avançar no entendimento dos mecanismos universais, os quais são responsáveis pelas transições de fases e padrões complexos observados nestes sistemas.

2.2 A aproximação de campo médio

Em mecânica estatística, poucos modelos podem ser resolvidos exatamente. Na maioria dos casos é necessário a utilização de métodos de aproximação. Uma das mais conhecidas e utilizadas é a teoria de campo médio, que consiste em aproximar a função de partição do sistema para obter suas propriedades termodinâmicas. Basicamente, substituem-se flutuações e correlações por seu valor médio e, na prática, tem-se um potencial médio atuando sobre uma partícula.

O objetivo agora é obter o modelo de campo médio de um sistema Ising bidimensional com interações ferromagnéticas e dipolares competindo. Para tanto, faremos uso do método variacional, o qual propõe aproximar a matriz densidade de equilíbrio total, primeiramente arbitrária, por um produto das matrizes densidade por partícula, cujos parâmetros são ajustados variacionalmente de tal forma que a energia livre total do sistema seja minimizada (*veja apêndice A*).

2.3 Energia livre de campo médio do modelo de Ising dipolar

O Hamiltoniano do modelo de Ising dipolar é dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i, \quad (2.1)$$

onde S_i são as variáveis de spin e h_i é um campo magnético perpendicular ao plano do filme, e

$$J_{ij} = \begin{cases} \delta - 1 & \text{se } i, j \text{ são vizinhos próximos} \\ 0 & \text{se } i = j \\ -\frac{1}{r_{i,j}^3} & \text{outros casos.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Fazendo uso do método variacional, podemos obter a teoria de campo médio para este hamiltoniano. Na expressão para a energia livre de campo médio variacional por partícula, a matriz densidade de prova é tomada como o produto das matrizes densidade de partícula única $\rho = \prod_i \rho_i$, e as matrizes densidade estão sujeitas aos vínculos,

$$\sum_{S_i=\pm 1} \rho_i = 1 \quad \text{e} \quad \sum_{S_i=\pm 1} S_i \rho_i = m_i. \quad (2.3)$$

Em sistemas com interações competitivas como o que estamos estudando, é observada uma magnetização global finita,

$$M = \sum_i m_i, \quad (2.4)$$

a qual apresenta, em baixas temperaturas, direções preferenciais na componente fora do plano da magnetização local m_i . A magnetização local m_i é dependente da temperatura, assim a tomaremos como parâmetro variacional do sistema.

Com estas considerações, obtemos o funcional da energia livre na aproximação de campo médio na forma

$$f_{MF} = -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j - \frac{1}{N} \sum_i h_i m_i + \frac{1}{2\beta N} \sum_i (1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i). \quad (2.5)$$

Na expressão (2.5), o primeiro termo do lado direito é a energia interna do sistema, o segundo contempla o campo externo aplicado e o último termo é a entropia.

Minimizando (2.5) com respeito ao parâmetro de ordem, ou seja, a magnetização local m_i , temos

$$m_i = \tanh \left[\beta \left(h_i + \sum_j J_{i,j} m_j \right) \right], \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.6)$$

A equação 2.6 descreve um sistema com N equações não lineares acopladas, assim, dependendo da forma das interações, as soluções podem ser bem complexas. Tomando como exemplo o sistema que estamos estudando, no qual uma solução possível é o padrão de faixas, esta solução será dependente da largura das faixas e, em regiões em que esta largura cresce muito, teremos muitas equações a serem resolvidas.

Capítulo 3

Diagrama de fases de campo médio

3.1 Soluções a campo nulo: equações de estado

Ao considerarmos interações competitivas em um sistema, uma solução possível é a solução de faixas, por exemplo, faixas verticais. Este padrão é observado mesmo sem um campo externo aplicado ao sistema, assim, neste primeiro momento, consideraremos o campo $h_i = H = 0$. Estamos considerando um modelo de Ising em uma rede quadrada de lado L . Esta solução periódica de faixas verticais de semi-período h , implica as seguintes condições:

$$m_{x,y} = -m_{x+h,y} \quad \forall \quad x, y \quad (3.1)$$

$$m_{x,y} = m_{x,y'} \quad \forall \quad y, y' \quad (3.2)$$

Assumindo estas condições e introduzindo transformadas de Fourier, o parâmetro de ordem m_i no espaço de Fourier é dado por

$$m_{x,y} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_x, k_y=0}^{L-1} m_{k_x, k_y} e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (3.3)$$

onde $N = L \times L$, $\vec{k} = (k_x, k_y)$ e $\vec{r} = (x, y)$ e $x, y = 0, \dots, L-1$ e $k_x, k_y = 2\pi n/L$ com $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L/2 - 1, \pm L/2$. Aplicando a condição (3.1) em (3.3), temos que

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = e^{i[k_x x + k_y y]} = e^{ik_x x} e^{ik_y y}$$

$$e^{ik_x x} e^{ik_y y} = -e^{ik_x(x+h)} e^{ik_y y} = -e^{ik_x x} e^{ik_x h} e^{ik_y y}$$

$$e^{ik_x h} = -1 . \quad (3.4)$$

Para que esta igualdade seja verdadeira, o argumento da função seno deve ser zero e o argumento da função cosseno deve ser um múltiplo inteiro negativo de π , então $k_x h = \pm(2l + 1)\pi$ com $2l + 1 \leq h$.

Agora, aplicando a condição (3.2) em (3.3), temos que

$$e^{ik_x x} e^{ik_y y} = e^{ik_x x} e^{ik_y y'}$$

$$e^{ik_y y} = e^{ik_y y'} . \quad (3.5)$$

Esta condição só é satisfeita para todo y, y' , se $k_y = 0$. Aplicando estas condições de periodicidade das soluções, reduzimos o número de vetores de onda a h , tomamos $k_y = 0$ e parametrizamos as soluções apenas através de k_x . Agora, a transformada de Fourier da magnetização local m_i em $1D$ pode ser escrita na forma

$$m_n = \frac{1}{\sqrt{h}} \sum_{k_x} m_{k_x} e^{ik_x n} , \quad (3.6)$$

e as equações de estado para o padrão de faixas podem ser escritas na forma,

$$m_n = \tanh \left[\frac{\beta}{\sqrt{h}} \left(\sum_{k_x} J_{k_x} m_{k_x} \right) e^{ik_x n} \right] , \quad (3.7)$$

onde tomamos $n = x$ por estar em $1D$. Aqui $n = 0, \dots, h - 1$, $J_{k_x} = J_{k_x, k_y=0}$. Na soma, $k_x = \pm(2l + 1)\pi/h$ com $l = 0, 1, 2, \dots$ e $2l + 1 \leq h$. E a transformada de Fourier da matriz de interação J_{ij} é dada por

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} = \frac{1}{h} \sum_{k_x} J_{k_x} e^{ik_x(i-j)} , \quad (3.8)$$

usando

$$\sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = N \delta_{\vec{k}, 0} \rightarrow \sum_n e^{ik_x n} = h \delta_{k_x, 0} . \quad (3.9)$$

De modo a obter as amplitudes m_n puramente reais, a condição $m_{-\vec{k}} = m_{\vec{k}}^*$ deve ser satisfeita, bem como $J_{-\vec{k}} = J_{\vec{k}}$. Aplicando estas condições de periodicidade da solução de faixas, abrimos as exponenciais complexas e explicitamos as partes real e complexa na solução, com isso obtemos uma solução geral válida para qualquer valor fixo da largura de listras h ,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{h}} \sum_{k_x > 0} [2\text{Re}(m_{k_x})\cos(k_x n) - 2\text{Im}(m_{k_x})\text{sen}(k_x n)] \\ &= \tanh \left[\frac{\beta}{\sqrt{h}} \sum_{k_x > 0} J_{k_x} [2\text{Re}(m_{k_x})\cos(k_x n) - 2\text{Im}(m_{k_x})\text{sen}(k_x n)] \right], \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e é tomado $k_B = 1$. Esta expressão nos dá um sistema de h equações transcendentais acopladas a serem resolvidas para h amplitudes de Fourier independentes $m_{\vec{k}}$.

A energia livre para este sistema pode ser escrita na forma

$$f_{MF} = -\frac{1}{2h} \sum_{k_x} J_{k_x} |m_{k_x}|^2 + \frac{1}{2\beta h} \sum_i [(1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i)], \quad (3.11)$$

com

$$J_{k_x} = 2\delta(\cos k_x + 1) - S(k_x, 0), \quad (3.12)$$

segundo a notação utilizada em [4]. O termo entrópico não foi transformado pois isto não reduziria sua complexidade, e

$$S(k_x, 0) \equiv \sum_i \frac{1}{r_{ij}^3} \cos(k_x x_i), \quad (3.13)$$

é uma função par com respeito a k_x . A expressão (3.13) pode ser reescrita na forma

$$S(k_x, 0) = 2 \sum_{x=1}^{\infty} \cos(k_x x) R(x) + 2\zeta(3), \quad (3.14)$$

onde

$$R(x) \equiv \sum_{y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{(x^2 + y^2)^{3/2}} = \frac{2}{x^2}, \quad (3.15)$$

é a soma sobre uma linha a uma distância x perpendicular a direção de k_x e $\zeta(x)$ é a função Zeta de Riemann, com $\zeta(3) \approx 1.202$. Com isto, (3.13) pode ser reescrita sob a forma

$$S(k_x, 0) \approx 4 \sum_{x=1}^{\infty} \frac{\cos(k_x x)}{x^2} + 2\zeta(3) = k_x^2 - 2\pi|k_x| + \frac{2\pi^2}{3} + 2\zeta(3), \quad (3.16)$$

e

$$J_{k_x} = 2\delta(\cos k_x + 1) - k_x^2 + 2\pi|k_x| - \frac{2\pi^2}{3} - 2\zeta(3). \quad (3.17)$$

As condições termodinâmicas do sistema são obtidas minimizando (3.11) com respeito a magnetização local m_i . Ao reduzirmos a temperatura a partir da fase desordenada, onde os $m_{\vec{k}} \equiv 0 \forall \vec{k}$, em T_c é observado um modo $m_{\vec{k}}$ com amplitude não nula, e esta temperatura é justamente o valor de J_{k_x} neste modo,

$$T_c = \max_{\vec{k}} J_{\vec{k}}, \quad (3.18)$$

onde este é o valor de \vec{k} para o qual $J_{\vec{k}}$ tem um máximo. Assim, nesta temperatura é observado uma transição de segunda-ordem entre uma fase ordenada (modulada) e uma fase desordenada.

Este sistema foi analisado por Pighín e Cannas [4] para valores de δ entre 0 e 4 e duas possíveis configurações para o estado fundamental, a solução antiferromagnética e a solução de faixas.

Neste capítulo estenderemos a análise deste sistema a valores maiores de δ (até $\delta = 10$), com principal interesse no comportamento da fase com modulação de faixas e na configuração do diagrama de fases em questão neste intervalo.

Analisamos numericamente a solução (3.10) para diferentes valores de δ , o qual é a razão entre os parâmetros de interação de troca e dipolar. Como já era esperado, observamos que para um mesmo valor de δ fixo a diferentes temperaturas, o h que minimiza a energia é diferente. A baixas temperaturas o h de equilíbrio para um dado δ é grande e decai monotonicamente com o aumento da temperatura, como mostrado na figura 3.1.

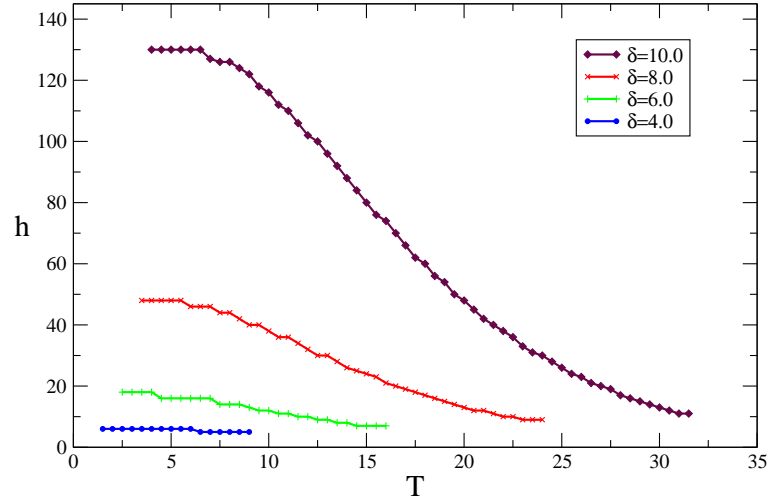


Figura 3.1: Variação na largura das listras com a temperatura para diferentes valores de δ .

Para δ pequeno, este comportamento com a temperatura é aproximadamente constante, pois mesmo em baixas temperaturas o h de equilíbrio é pequeno. Em uma aproximação de campo médio isto já era esperado pois para $T < T_c$, a amplitude de modulação diminui com o aumento da temperatura, indo a zero em $T = T_c$, onde há uma transição de segunda ordem da fase modulada para uma fase homogênea.

Estudos teóricos baseados em paredes de domínio [20, 21] predizem um decréscimo exponencial do h de equilíbrio com a temperatura até uma escala de comprimento atômica muito próxima a temperatura de transição T_c . Experimentalmente, os resultados a esta questão ainda são um pouco controversos [22, 23]; em [22] um estudo experimental em $Fe/Ni/Cu(001)$ usando microscopia eletrônica de fotoemissão, mostrou que a largura do domínio de faixas decresce exponencialmente quando o sistema se aproxima de T_c . Portmann *et al.* observaram em [23], que em um pequeno intervalo de temperaturas próximas a temperatura de transição, o padrão de faixas, que é um padrão estacionário a baixas temperaturas, torna-se móvel.

Em concordância com [4], também observamos que a dependência do semi-período da modulação h com a razão entre a intensidade de interação de troca e dipolar δ se dá de

forma exponencial e, para grandes valores de δ a $T=0$, o h de equilíbrio obedece a relação $h(\delta) \sim e^{\delta/2}$, como observado na figura 3.2 (a).

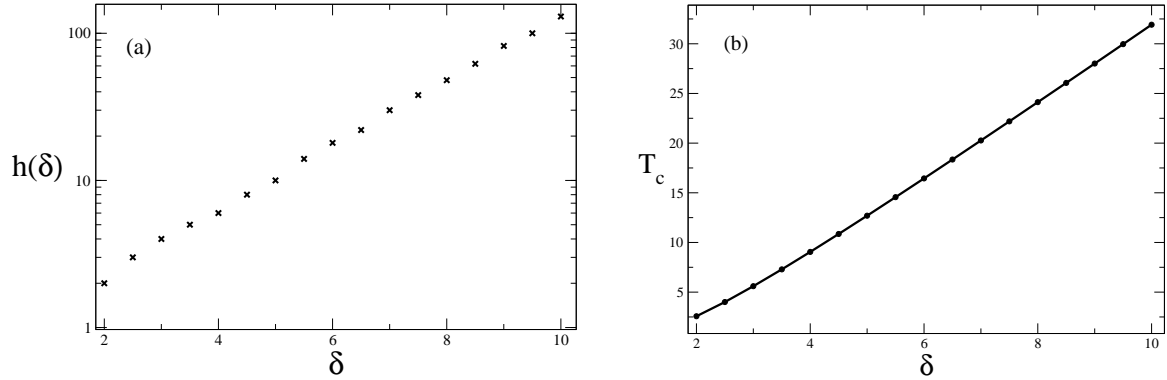


Figura 3.2: Variação da largura de equilíbrio das listras em função dos valores de δ entre 2 e 10 para $T = 0$ em escala log-linear em (a). Temperatura de transição para $2 \leq \delta \leq 10$ em (b).

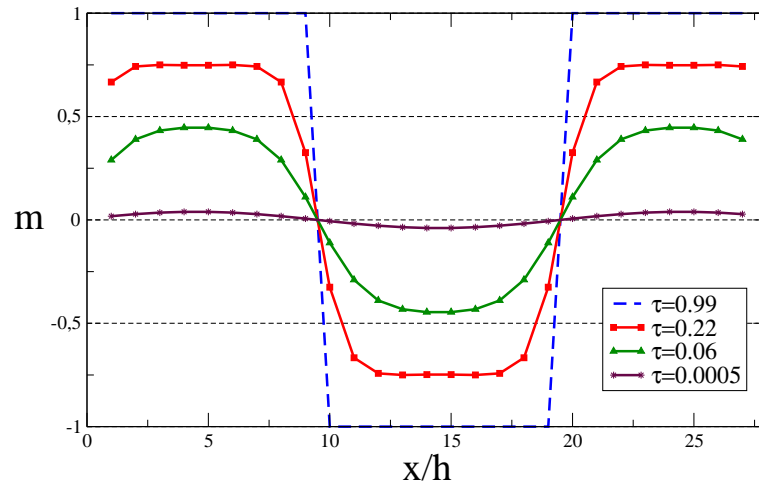


Figura 3.3: Mudança no perfil da magnetização com a temperatura para $h = 10$ e $\delta = 10$. $\tau = 0.99, 0.22, 0.06$ e 5×10^{-4} respectivamente.

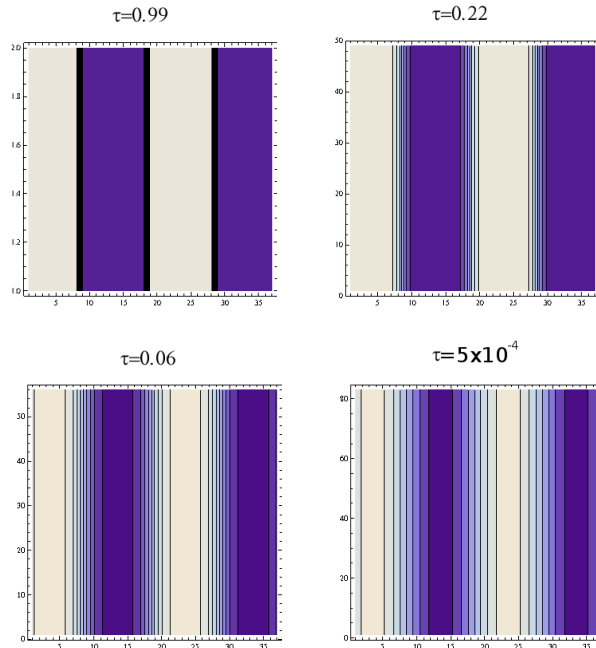


Figura 3.4: Contorno do padrão modulado de faixas para $h = 10$ e $\delta = 10$ modificado pela temperatura.

Os valores de h que minimizam a energia livre do sistema para valores de δ no intervalo $2 \leq \delta \leq 10$ a $T = 0$, foram obtidos numericamente utilizando o software Mathematica, bem como os valores da temperatura de transição neste intervalo, de acordo com a relação (3.18), na figura 3.2 (b).

O perfil da fase modulada é mostrado na figura 3.3. Os mesmos foram obtidos através das equações transcendentais de campo médio. A figura exhibe a mudança no perfil da magnetização com a temperatura reduzida $\tau = (T_c - T)/T_c$.

Vemos que em baixas temperaturas o sistema exhibe um perfil bem definido, tipo onda quadrada, os spins apresentam uma configuração periódica simétrica. Com o aumento da temperatura este perfil começa a assumir uma forma senoidal com amplitudes cada vez menores, até que próximo à temperatura de transição a amplitude de modulação é

A figura 3.4 mostra o gráfico de contorno do perfil da magnetização variando com a

temperatura.

As linhas de estabilidade, ou seja, os valores do h de equilíbrio para diferentes δ são mostrados na figura 3.5. É possível observar que para grandes valores de δ as linhas de estabilidade se acumulam próximo a linha de transição T_c entre a fase com modulação de faixas e a fase ferromagnética desordenada.

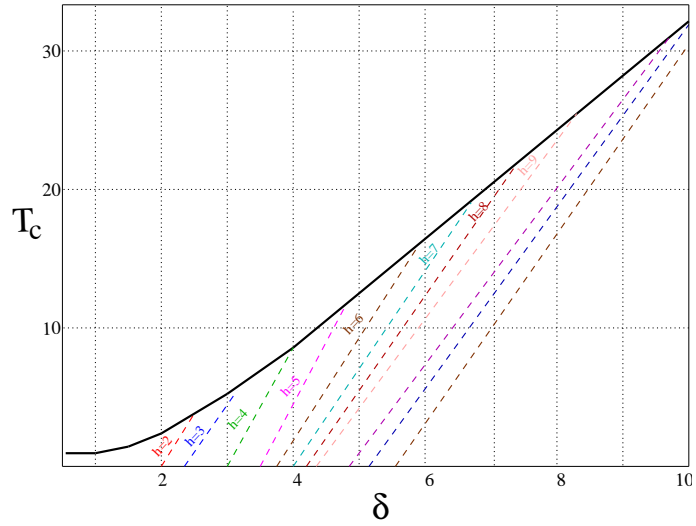


Figura 3.5: Linhas tracejadas são linhas de estabilidade para a solução de listras de Campo Médio. Linha cheia é a linha de transição.

Este efeito já havia sido observado por Piguín e Cannas em [4], onde o estudo foi realizado para valores de δ entre 0 e 4. Eles observaram que em algumas regiões, devido a metaestabilidade crescente com o valor de δ , a solução de faixas não é a solução estável. Nestas regiões aparecem soluções compostas por faixas com larguras diferentes, os quais

T	23.0	23.5	24.0	24.5	25.0	25.5	26.0	26.5	27.0	27.5	28.0	28.5	29.0	29.5	30.0	30.5	31.0	31.5
h	33	31	30	28	26	24	23	21	20	19	17	16	15	14	13	12	11	11

Figura 3.6: Valores do h de equilíbrio para temperaturas fixas a $\delta = 10$.

são chamados estados híbridos.

Em nosso estudo, observamos uma grande metaestabilidade no sistema ao aumentarmos o valor de δ . Para grandes valores de δ , o h de equilíbrio varia muito rápido com a temperatura, como mostra a tabela 3.6. Nela é mostrado o h de menor energia para cada valor de temperatura para $\delta = 10$. Os valores de temperatura mostrados na tabela são altos com referência à temperatura de transição que, para $\delta = 10$, é $T_c = 31.919$, mas esta taxa de variação ocorre para todo intervalo de temperatura, de forma que, para $T = 4.0$ ($\tau = 0.87$), o h de estabilidade do sistema é $h = 130$.

3.2 Soluções com campo externo: equações de estado

Em um ferromagneto de Ising-dipolar em duas dimensões, a solução de faixas observada a campo nulo é perfeitamente simétrica. Nesta configuração, os sítios da rede quadrada de lado L considerada na seção 3.1, são ocupados por variáveis de Ising $\sigma = \pm 1$. Estes estão acoplados pela interação de troca de curto alcance e frustrados pela interação dipolar de longo alcance. Ao adicionarmos um campo externo homogêneo ao sistema, este, junto com a interação de troca, favorece um estado espacialmente uniforme, o que leva a uma quebra da simetria *up-down* na solução de faixas.

Com o aumento do campo magnético aplicado (o qual consideraremos positivo), a direção *up* dos spins será privilegiada, levando a um “alargamento” das faixas neste sentido e um conseqüente “estreitamento” das faixas de spin *down*.

Na seção 3.1 a simetria da solução de faixas é explicitada pela condição (3.1), a qual não poderá ser considerada nas soluções com campo externo pela perda desta simetria. Agora, precisamos também levar em conta os modos de Fourier pares nas soluções, os quais foram negligenciados na seção 3.1 por serem sempre nulos.

Com estas considerações, o sistema é dado por $2h$ equações transcendentais acopladas para $2h$ amplitudes de Fourier $m_{\vec{k}}$, com h sendo o semi-período; a partir deste ponto tomaremos $2h = \lambda$.

Agora, a transformada de Fourier para o parâmetro de ordem é dada por

$$m_n = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sum_{k_x} m_{k_x} e^{ik_x n}, \quad (3.19)$$

onde k_x agora inclui os modos pares e é dado por $k_x = \pi n/h$ com $n = -h+1, \dots, 0, \dots, h$. As equações de estado para o sistema com campo externo para o padrão de faixas assimétricas pode ser reescrito na forma

$$m_n = \tanh \left\{ \beta \left[H + \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sum_{k_x} J_{k_x} m_{k_x} \right) e^{ik_x n} \right] \right\}, \quad (3.20)$$

com J_{k_x} dado pela expressão (3.17) e $\beta = 1/k_B T$ com $k_B = 1$.

A solução geral obtida para este padrão é dada por

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sum_{k_x > 0} [2\text{Re}(m_{k_x})\cos(k_x n) - 2\text{Im}(m_{k_x})\text{sen}(k_x n)] \\ = & \tanh \left\{ \beta \left[H + \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sum_{k_x > 0} J_{k_x} [2\text{Re}(m_{k_x})\cos(k_x n) - 2\text{Im}(m_{k_x})\text{sen}(k_x n)] \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.21)$$

A energia livre, agora inclui o termo que descreve o campo H homogêneo e é escrita como

$$\begin{aligned} f_{MF} = & -\frac{1}{2\lambda} \sum_{k_x} J_{k_x} |m_{k_x}|^2 + \frac{1}{2\beta\lambda} \sum_i [(1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i)] \\ & -\frac{1}{\beta} \ln 2 - \frac{1}{\lambda} \sum_i H m_i . \end{aligned} \quad (3.22)$$

De forma análoga ao que fizemos na seção 3.1, as condições termodinâmicas do sistema são obtidas a partir da minimização da energia livre (3.22) com relação ao parâmetro de ordem m_i .

Para analisar este padrão de modulação, trabalharemos fixando a intensidade relativa entre as duas interações δ . Fixando $\delta = 6.0$, observamos como o sistema evolui com o aumento do campo magnético homogêneo aplicado.

O perfil da modulação pode ser observado na figura 3.7. Fixamos uma temperatura e observamos o comportamento da modulação com o aumento do campo magnético externo aplicado. Na figura da esquerda consideramos uma temperatura baixa, $T = 2.0$, e a campo nulo obtemos o perfil perfeitamente simétrico esperado, com o aumento do campo magnético, vemos que a direção *up* da orientação de spins está sendo privilegiada. Isto acontece, pois escolhemos valores positivos para H o que faz com que o sentido positivo de orientação das faixas seja favorecido com o aumento do campo. Com valores ainda maiores do campo, o sistema tende a um estado uniformemente magnetizado. Como vimos no estudo a campo nulo, a amplitude de modulação diminui com o aumento da temperatura, indo a zero para temperaturas suficientemente altas. Neste caso, com $H \neq 0$, a figura da direita mostra a modulação dos perfis para uma temperatura alta para esta configuração (com $\delta = 6.0$, a transição ocorre em $T \simeq 16.4$ a campo nulo, já o ponto de transição em $T = 15.5$ ocorre para $H = 0.301$), onde é possível observar que a amplitude de modulação

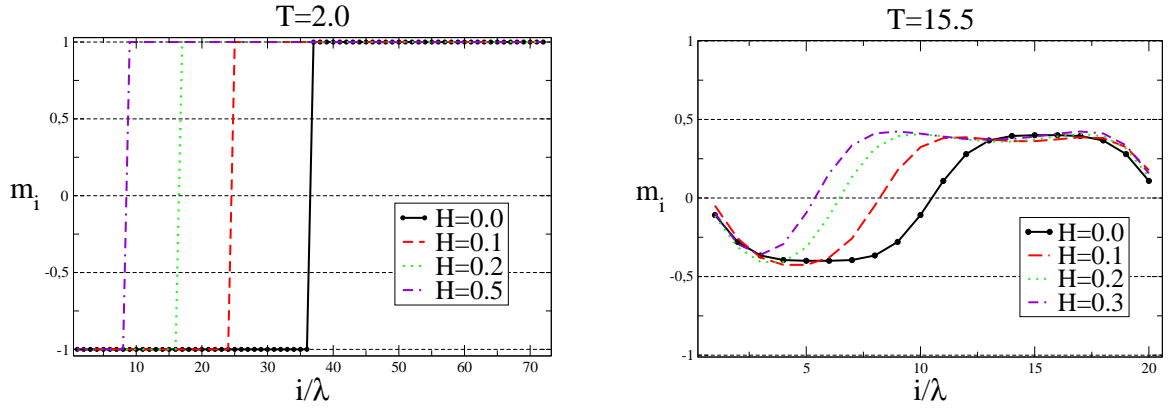


Figura 3.7: Mudança no perfil da magnetização com o aumento do campo externo a uma temperatura fixa para $\delta = 6.0$.

não vai a zero próximo a transição; isto acontece pois a presença do campo magnético favorece um estado homogeneamente magnetizado mas diferente de zero, fazendo com que o sistema sofra uma transição em T_c para um estado ferromagnético com magnetização proporcional ao campo aplicado.

É interessante também analisarmos como se dá esta dependência da largura das faixas, ou seja, como se comporta o comprimento da modulação com o crescimento do campo magnético.

A figura 3.8 mostra as soluções de campo médio para $T = 2.0$. A esta temperatura o campo crítico observado, valor de campo no qual a largura das faixas diverge, é $H_c \approx 0.345$. Na figura são apresentadas três curvas, a curva formada por asteriscos pretos exibe a largura das faixas λ , a curva destacada por triângulos vermelhos mostra a componente positiva da magnetização λ^+ , a qual segue o comportamento da largura das faixas e também diverge, a curva com círculos azuis mostra os componentes negativos da magnetização ou assimetria λ^- , esta decresce lentamente a partir de um certo valor em $H = 0$. Para $H > H_c$ o estado ferromagnético apresenta menor energia livre. No entanto, a real divergência na largura das faixas não foi possível alcançar por limitações computacionais sobre o problema variacional

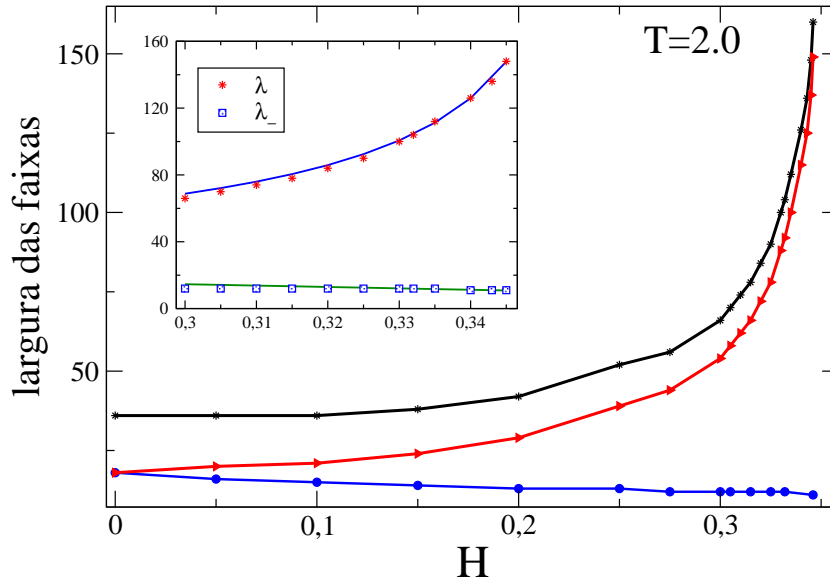


Figura 3.8: *Largura das faixas λ (asteriscos pretos), componente positiva da magnetização λ^+ (triângulos vermelhos) e a assimetria λ^- (círculos azuis) em função do campo magnético para $T = 2$. Inset: fits de acordo com previsões analíticas da referência [6].*

que está sendo resolvido. Mas, então qual seria o comportamento real da largura das faixas próximo ao campo crítico?

Recentemente, Johansen et. al. [6] obtiveram resultados exatos para estes parâmetros em um modelo com paredes estreitas a temperatura zero. Nesse trabalho, eles obtiveram que a largura da faixa a $T = 0$ diverge como uma lei de potência:

$$\lambda \propto (H - H_c)^{-1/2}. \quad (3.23)$$

De modo a comparar nossos resultados, e comprovar que se comportam da mesma maneira a baixas temperaturas, fitamos nossos dados para $T = 2$ com a lei de potências próximo ao campo crítico e obtivemos uma ótima concordância com as previsões exatas para o modelo de [6] em $T = 0$. Os fits são mostrados no inset da figura 3.8.

Uma importante conclusão é que a divergência da largura das faixas em um valor crítico do campo implica em uma transição contínua da fase modulada para a fase homogênea, em

desacordo com usuais expectativas. Nas soluções numéricas é possível observar que faixas com larguras finitas continuam a existir acima da linha crítica, estas faixas representam soluções metaestáveis com energia livre maior que a energia livre do estado ferromagnético, gerando um cruzamento em algum valor de campo. No entanto, isto não implica em uma transição de primeira ordem de forma que a solução com mínima energia livre abaixo da linha crítica corresponde a uma largura de faixa continuamente crescente, a qual diverge em um valor de campo crítico, tendendo de forma contínua para a solução homogênea.

3.2.1 Diagrama de fases

A figura 3.9 mostra a linha de transição entre as fases modulada e ferromagnética. Esta linha foi obtida através de um programa que minimiza a energia livre numericamente com relação ao parâmetro de ordem do sistema usando o método *Simulated Annealing* (veja apêndice B).

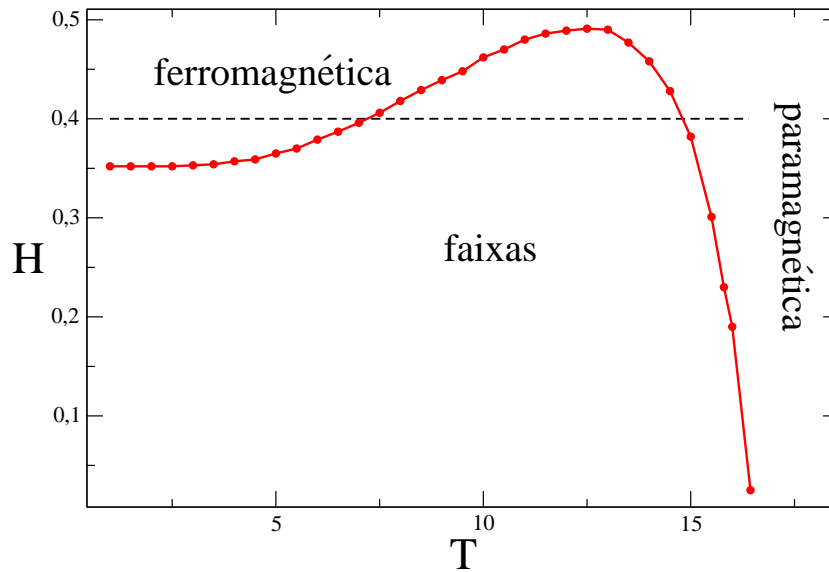


Figura 3.9: Diagrama de fases campo versus temperatura para $\delta = 6.0$.

No programa que minimiza a energia livre do padrão de faixas assimétricas, fixamos a intensidade $\delta = 6.0$ e, para um h e uma temperatura fixa, obtemos o valor da energia livre para um dado valor de campo H . O mesmo procedimento é realizado para minimizar a energia livre do estado ferromagnético com os mesmos valores de δ , T e H .

Rodamos os dois programas paralelamente observando o valor da energia livre nos dois casos, mudamos H e rodamos novamente até encontrar o campo magnético crítico H_c onde ocorre a transição, ou seja, o campo para o qual a energia livre do estado ferromagnético passa a ser maior do que a energia do padrão de faixas. De posse desta informação, minimizamos a energia livre do padrão de faixas para diferentes valores do semi-período

da modulação h de forma a obter o valor que gera a menor energia para esta configuração. Este procedimento foi realizado para todo o intervalo de temperatura que corresponde a temperatura próxima de zero até a transição para $\delta = 6.0$.

Com esses dados, obtemos o diagrama de fases H versus T , exibido na figura 3.9. O gráfico mostra uma transição inversa uniforme-modulada-uniforme, como já era esperado a partir de resultados teóricos prévios obtidos em um modelo de Ginzburg-Landau [3] e experimentais em filmes ferromagnéticos ultrafinos [1]. Reduzindo a temperatura a partir da fase homogênea, o campo H que torna a fase modulada o estado de equilíbrio para o sistema aumenta muito rapidamente até um $H \simeq 0.48$ a uma temperatura $T \simeq 12.5$, a partir de onde H_c começa a diminuir, a linha crítica decai continuamente até $T \simeq 5.0$, então o campo crítico se mantém aproximadamente constante ($H_c \approx 0.35$) até temperaturas baixas.

Nosso diagrama está em concordância com o obtido pelos autores em [3], visto que o limite de validade da aproximação utilizada no modelo da referência é $T/T_c \approx 0.6$. No modelo Ginzburg-Landau estudado, ao reduzir a temperatura, a largura das faixas passa a um regime de saturação. Em altas temperaturas é observado uma pequena região onde a fase de bolhas é a configuração de equilíbrio.

Embora soluções de bolhas estejam em competição com a solução de faixas e também possam ser termodinamicamente estáveis em alguma região do diagrama de fases, o domínio de estabilidade desta configuração é muito pequeno. Em nosso sistema, um modelo de Ising em uma rede quadrada, estas soluções não são bolhas contínuas que diminuem a energia, mas são bolhas hexagonais ou quadradas, bolhas em uma rede. Nestas configurações, é muito provável que se obtenha uma energia livre maior que na configuração de faixas assimétricas em grande parte do diagrama $H \times T$.

Em [1] os autores obtiveram, ao resfriar uma amostra de $Fe/Cu(100)$ a campo fixo, que a fase de bolhas aparece em uma pequena região ($T = 333K \rightarrow 327K$) antes de o sistema passar a uma fase uniforme. É possível que estas imagens correspondam a configurações metaestáveis, porém de vida longa, mas não se sabe ao certo se as configurações observadas

experimentalmente a baixas temperaturas são as configurações de equilíbrio do sistema.

Em [7], através de simulação Monte Carlo em um sistema de Ising-dipolar $2D$, foi observada uma descontinuidade no diagrama H versus η , onde η é um parâmetro que define a quebra de simetria frente a rotações de $\pi/2$, a uma temperatura fixa. Este parâmetro assume o valor 1 em um estado de faixas perfeitamente ordenado e 0 para qualquer fase com simetria rotacional $\pi/2$. Os autores mostram “saltos” no valor da magnetização para três valores de campo externo, $H \simeq 0.84$, $H \simeq 1.34$ e $H \simeq 2.40$.

3.2.2 Análise das energias

De forma a compreender o que gera esta reentrância no diagrama de fases analisamos dois valores fixos do campo magnético, $H = 0.3$, ponto no qual o padrão de faixas é o estado de equilíbrio até temperaturas baixas e $H = 0.4$, onde o estado ferromagnético passa a ser o estado de equilíbrio a partir de $T \simeq 7.5$ até temperaturas baixas.

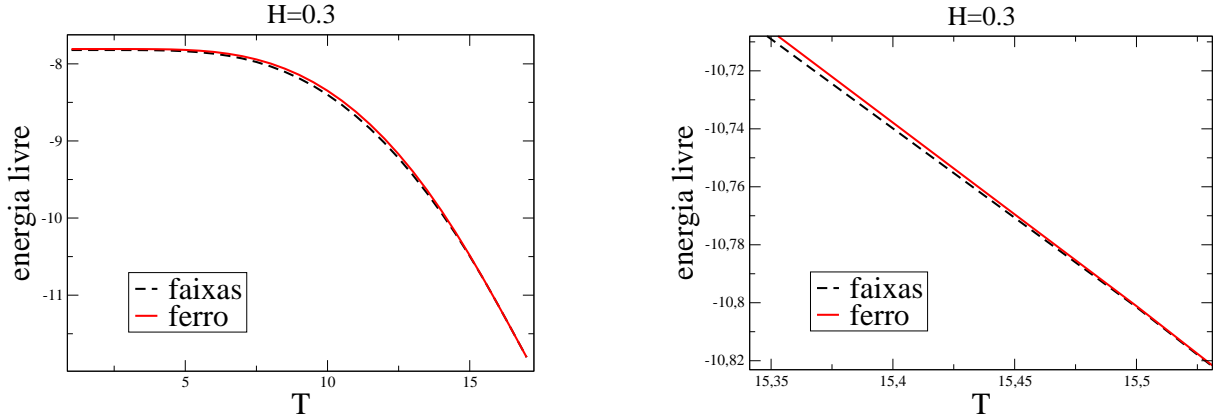


Figura 3.10: Diagrama $T \times$ Energia livre para $\delta = 6.0$, para um campo magnético fixo $H = 0.3$. Linha tracejada são os valores de energia para o padrão de faixas e a linha cheia relativa a fase ferromagnética.

A figura 3.10 mostra o gráfico da energia livre em relação à temperatura para $H = 0.3$. Neste vemos que as energias do padrão de faixas assimétricas e do estado ferromagnético são bem próximas. A energia de faixas é menor que a energia ferro para todo o intervalo de temperaturas, até que em $T \simeq 15.5$ as duas energias se encontram, exatamente como esperávamos a partir do diagrama 3.9 onde a transição para $H = 0.3$ ocorre em $T \simeq 15.52$.

A energia livre do nosso sistema é composta por três termos, o termo devido a energia interna, ou seja, a interação de troca mais a interação dipolar, a entropia e um termo relativo ao campo magnético aplicado. Queremos entender o que está dando origem à reentrância no diagrama de fases, seria um dos termos que compõe a energia livre ou a competição gerada por estes termos seria a responsável?

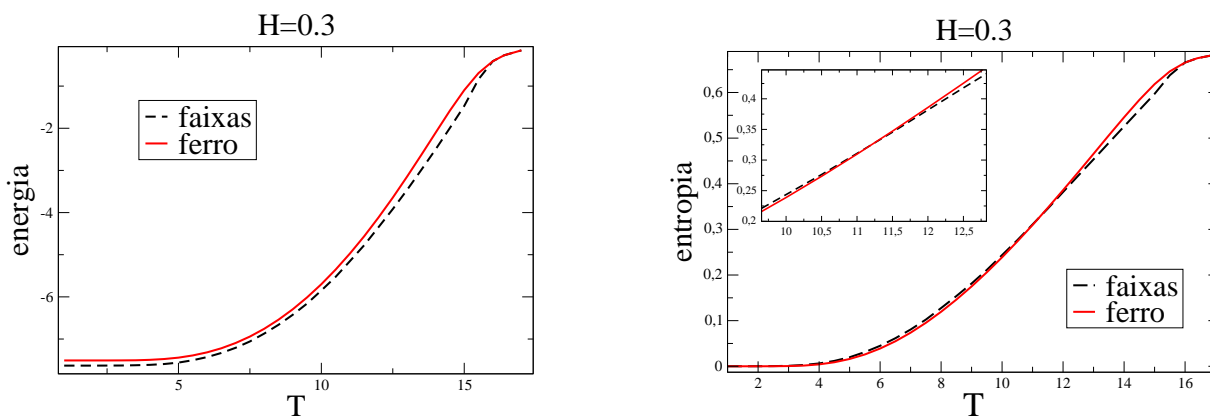


Figura 3.11: Diagrama $T \times \text{Energia}$ e $T \times \text{Entropia}$ respectivamente, para $\delta = 6.0$ e $H = 0.3$. Linha tracejada são os valores de energia para o padrão de faixas e a linha cheia relativa a fase ferromagnética.

A figura 3.11 mostra os gráficos da energia interna e da entropia em função da temperatura para $H = 0.3$, respectivamente. Para este valor de campo, a energia interna do padrão de faixas é menor que a do estado ferromagnético para todo o intervalo de temperaturas, até se encontrarem em $T \simeq 15.5$, onde ocorre a transição. Já no gráfico da entropia, partindo de altas temperaturas, o padrão de faixas possui menor entropia do que o estado ferro até uma temperatura $T \simeq 11.2$, onde ocorre um cruzamento e a entropia do estado ferro passa a ser menor até temperaturas baixas. Estas curvas nos mostram que, ao passo que reduzimos a temperatura, com a mesma regularidade nos dois estados, o estado ferromagnético exibe uma perda na entropia mais acentuada que o padrão de faixas.

Se observarmos este ponto no gráfico 3.9, vemos que este se localiza dentro da região onde o padrão de faixas é o estado de equilíbrio e não é responsável diretamente pela transição. No gráfico 3.12, que mostra a magnetização do sistema para todo o intervalo de temperaturas para o padrão de faixas e ferromagnético, esta temperatura $T \simeq 11.2$ encontra-se em uma região em que a magnetização do padrão de faixas comporta-se de forma irregular.

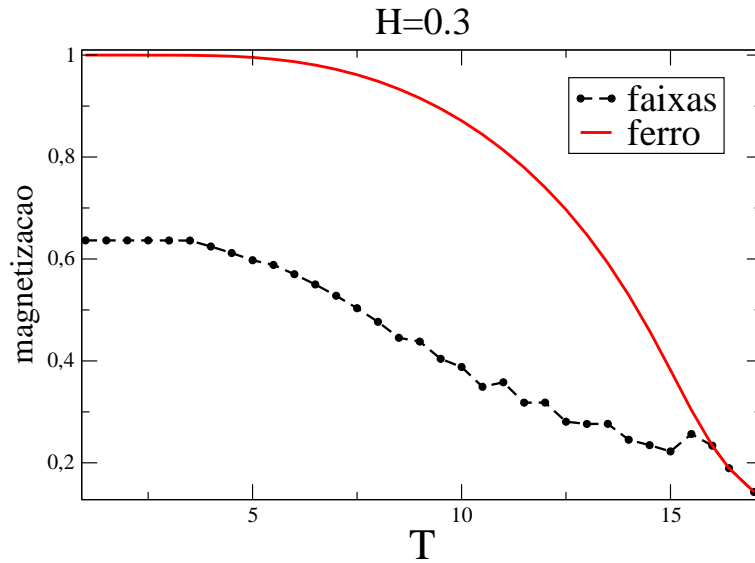


Figura 3.12: Gráfico da magnetização em função da temperatura para $H = 0.3$.

Vimos que para $H = 0.3$ a energia livre do padrão de faixas é menor que a do estado ferro para todo o intervalo de temperaturas. Agora, a figura 3.13 mostra o gráfico da energia livre em função da temperatura para o padrão de faixas assimétricas e para o estado ferromagnético para $H = 0.4$.

Vemos que as energias livres são muito próximas em todo o intervalo de temperaturas, mas se observarmos na figura 3.14, onde 3.13 é ampliado em dois intervalos de T específicos (à esquerda $T \simeq 5.5 - 8.5$ e à direita $T \simeq 14.5 - 14.8$), à direita observamos a aproximação das energias dos dois estados até a junção de ambas em $T \simeq 14.7$, e a partir deste ponto a energia livre do padrão de faixas tangencia a energia livre do estado ferromagnético até temperaturas mais altas. Este comportamento nos mostra uma transição contínua do estado modulado para o estado homogêneo, e está em concordância com 3.9 onde a transição de fases modulada-uniforme ocorre em $T \simeq 14.72$ para $H = 0.4$. Na figura da esquerda vemos que, em $T \simeq 7.5$, as energias livres se cruzam, ou seja, partindo de baixas temperaturas a energia livre do estado ferromagnético é menor que a energia livre do padrão de faixas. Este comportamento na transição nos leva a pensar que trata-se de

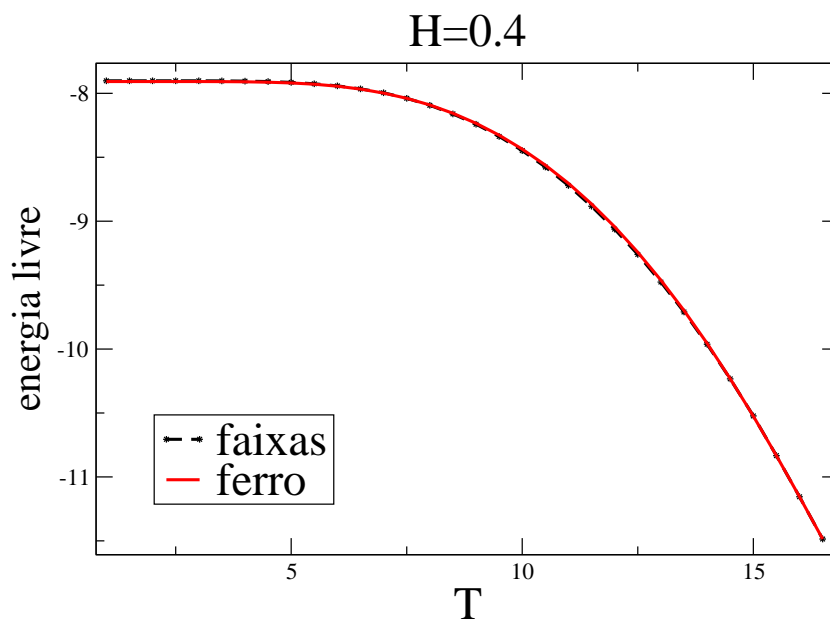


Figura 3.13: Diagrama $T \times$ Energia livre para $\delta = 6.0$, para um campo magnético fixo $H = 0.4$. Linha tracejada são os valores de energia para o padrão de faixas e a linha cheia relativa a fase ferromagnética.

uma transição de primeira ordem, o que não é verdade.

Como discutido anteriormente, na análise da assimetria das faixas, por limitações computacionais não conseguimos alcançar valores suficientemente altos do comprimento de modulação, o qual diverge na transição, mas como vimos nossos resultados estão em boa concordância com os resultados obtidos em [6]. Sendo assim, este cruzamento é observado pois, para campos acima do campo crítico, soluções de faixas com largura finita ainda existem como soluções metaestáveis, com energia livre maior que a energia da solução ferromagnética.

A figura 3.15 ilustra o diagrama da energia livre em função da temperatura para três valores de h (semi-período das faixas) fixos e também para o estado ferromagnético. É possível ver que a linha com $h = 20$ está bem acima da linha que representa a energia da solução homogênea. Para h 's maiores, notamos uma aproximação das linhas respectivas a

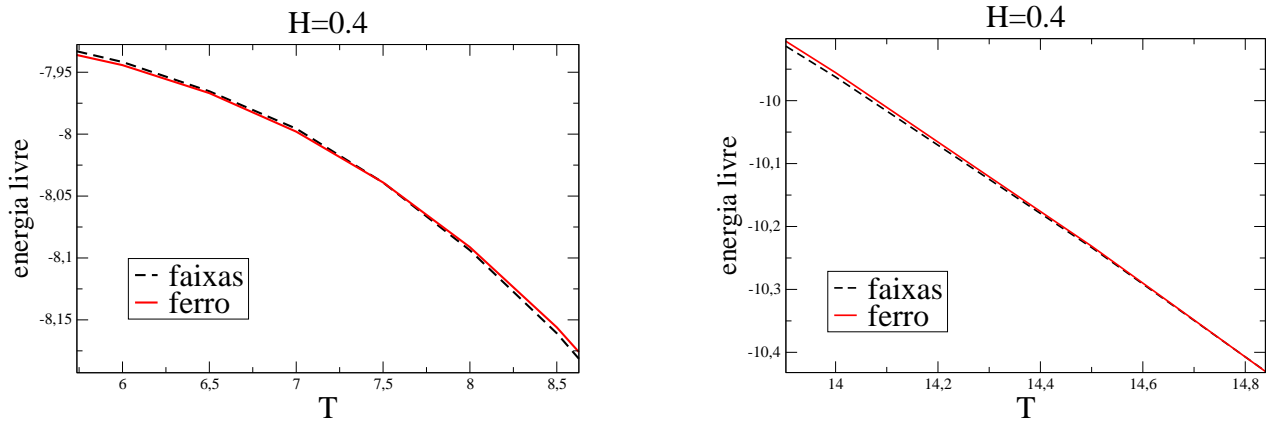


Figura 3.14: Zoom no gráfico 3.13 para explicitar os cruzamentos das energias.

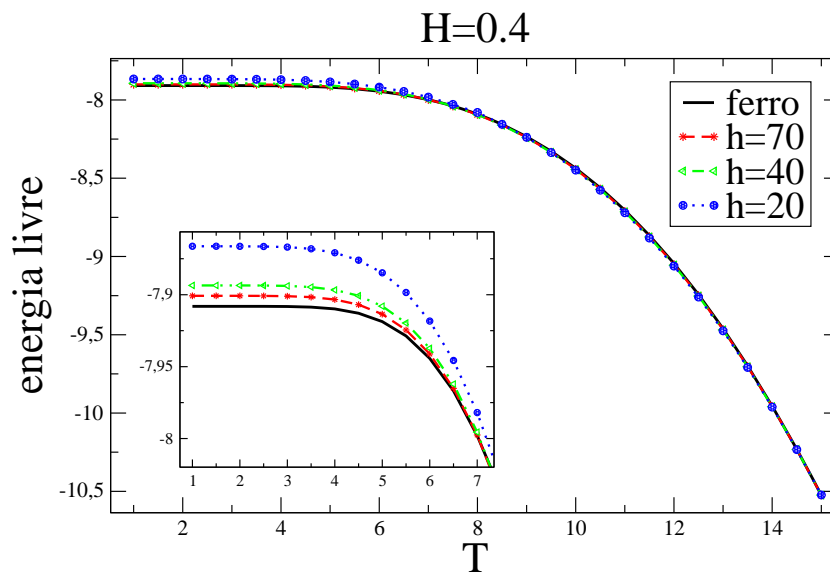


Figura 3.15: Diagrama $T \times$ Energia livre para $\delta = 6.0$, para um campo magnético fixo $H = 0.4$, para três valores fixos de h e solução ferro.

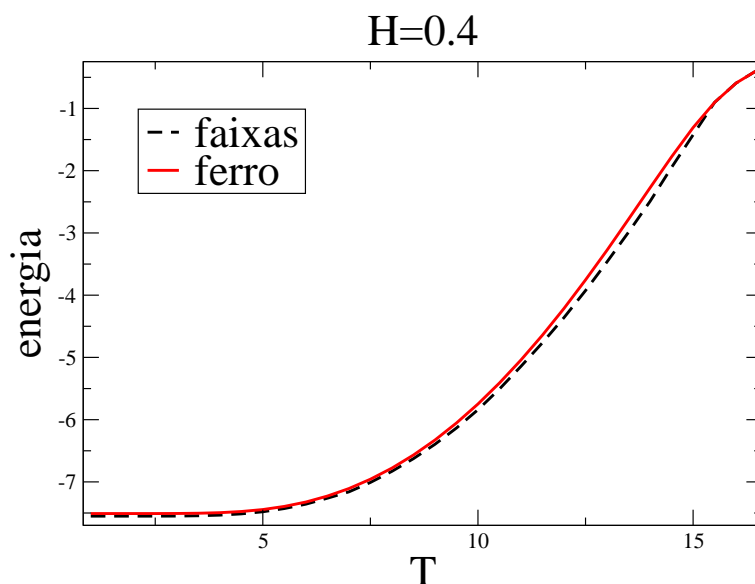


Figura 3.16: Diagrama $T \times Energia$ para $\delta = 6.0$ e $H = 0.4$.

estes valores em relação ao estado ferro, ou seja, para comprimentos de modulação maiores obtemos menores energias livres.

Se pudéssemos, numericamente, aumentar o h indefinidamente, observaríamos a divergência na largura das faixas e a linha que descreve a energia livre do padrão de faixas tangenciaria a linha relativa ao estado ferromagnético a partir da transição, que ocorre em $T \simeq 7.5$, até temperaturas baixas, o que é esperado em uma transição de fases contínua.

A figura 3.16 mostra o gráfico da energia interna em função da temperatura para $H = 0.4$. Da mesma forma que em 3.11, a energia de faixas é menor que a energia ferromagnética para todo o intervalo de temperaturas, embora com valores bem mais próximos para este valor de campo.

Na figura 3.17, vemos o gráfico da entropia em função da temperatura para $H = 0.4$. As duas linhas são bem próximas para todo T . Partindo de altas temperaturas, a entropia de faixas é menor que a entropia ferro, até que em $T \simeq 11.8$ há o cruzamento das entropias dos dois estados e a entropia do estado ferromagnético passa a ser a de equilíbrio até temperaturas baixas.

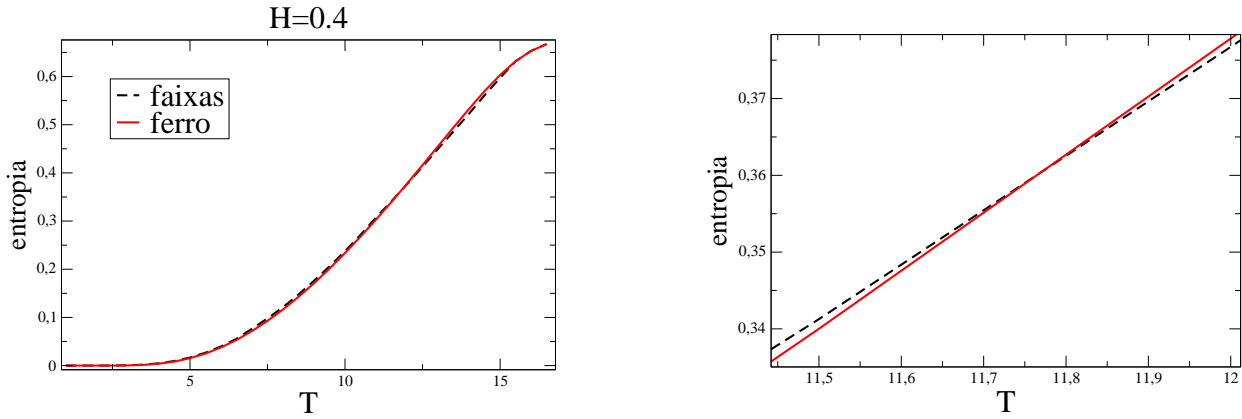


Figura 3.17: Diagrama $Entropia \times T$ para $\delta = 6.0$ e $H = 0.4$.

Este comportamento também foi observado nas entropias para $H = 0.3$ onde há um cruzamento em torno de $T \simeq 11.2$. Este ponto $T \simeq 11.8$, quando observado em 3.9, encontra-se dentro da região em que o padrão de faixas é o estado estável, portanto, também não é responsável direto pela transição.

A figura 3.18 mostra a magnetização do sistema para o estado ferromagnético, para o padrão de faixas e para o estado de equilíbrio, ou seja, esta linha possui valores da magnetização do padrão de faixas e ferromagnético para temperaturas em que estes apresentam menor energia.

Em altas temperaturas as três linhas apresentam pontos com valores iguais, em $T \simeq 14.8$ a magnetização do padrão de faixas começa a apresentar valores menores que a magnetização do estado ferromagnético, e estes apresentam um aumento gradativo ao passo que a temperatura é reduzida. Ao se aproximar da transição a magnetização do padrão de faixas passa a aumentar mais rapidamente alcançando um valor em torno de 0.85, até que em $T \simeq 7.4$, temperatura na qual ocorre a transição, esta assume um valor aproximadamente constante até temperaturas baixas.

Desta análise das energias que compõem a energia livre do sistema concluímos que, tanto a transição da fase homogênea para a fase modulada a altas temperaturas quanto a

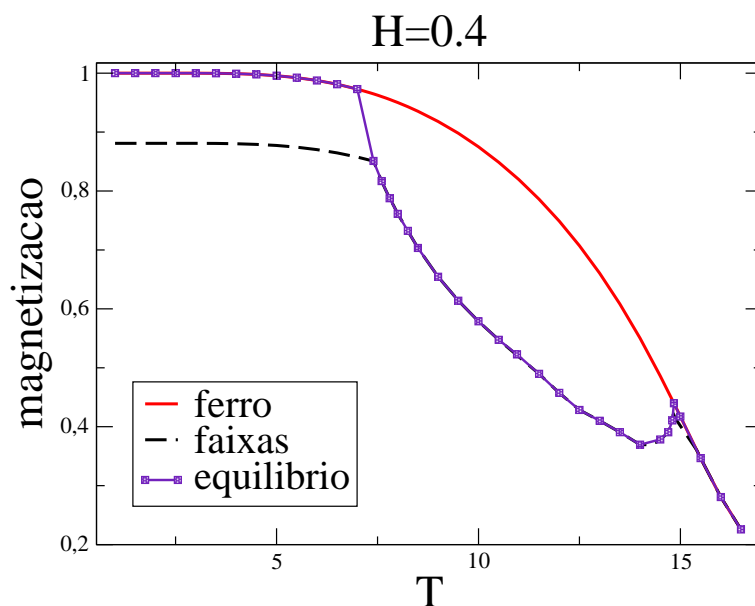


Figura 3.18: Gráfico da magnetização em função da temperatura para $H = 0.4$.

transição inversa da fase modulada para uma fase homogênea a baixas temperaturas, são transições contínuas. Agora precisamos nos certificar do que realmente está gerando esta transição inversa que restaura a invariância espacial do sistema a baixas temperaturas.

A estabilidade de uma fase simétrica, restaurada a partir de uma fase em que a simetria havia sido quebrada, a baixas temperaturas, pode ser atribuída a competição entre a energia e a entropia quando a temperatura ou algum outro parâmetro de controle termodinâmico é variado. Esta quebra de simetria já foi relatada muitas vezes, um caso conhecido corresponde a “ *fusão inversa*” e ao “ *congelamento inverso*” [24]. Nesse trabalho os autores afirmam que “*a fusão inversa ocorre se, e somente se, a então chamada fase ‘ordenada’ (cristal) admite mais entropia que o estado ‘desordenado’; isto pode ocorrer, por exemplo, se em uma fase líquida alguns dos graus de liberdade dos constituintes elementares estão congelados, e fundem na fase cristalina.*”

Em sistemas de spins, como nosso modelo para filmes ferromagnéticos ultrafinos, o fenômeno de congelamento inverso foi observado principalmente em descrições teóricas de

vidros de spin e modelos desordenados, nos quais a frustração conduz a uma contribuição entrópica complexa [25, 26, 27, 28].

É conhecido que o fenômeno da reentrância muitas vezes ocorre devido a efeitos entrópicos. Em nosso sistema, em baixas temperaturas, a entropia é aproximadamente zero, e nesta região os perfis estão saturados, como observamos anteriormente. Nesta região, um aumento importante na entropia pode ocorrer quando os m'_i s deixam de tomar valores extremos, e isto ocorre primeiramente nas paredes de domínio. De forma a analisar este comportamento e entender se este influencia o aparecimento da reentrância no diagrama de fases, estudamos, em comparação com nosso modelo de campo médio completo, dois outros modelos os quais diferem apenas na estrutura das paredes de domínio: um modelo “*sharp-wall*”, no qual as transições entre magnetizações positivas e negativas no padrão de faixas são abruptas, e um modelo o qual chamamos de “*two-spin-wall*”, onde as transições envolvem dois spins.

Iremos analisar de forma detalhada cada termo componente da energia livre, energia, entropia e magnetização, e observar como se comportam em comparação com o modelo completo, bem como o comportamento do diagrama de fases de cada modelo.

Capítulo 4

A transição inversa

Na seção 3.2 do capítulo 3 analisamos o padrão de faixas assimétricas em nosso modelo de campo médio. Vimos que o comportamento das energias que compõem o modelo, quando analisadas individualmente, é muito semelhante, tanto na região em que o padrão de faixas é o padrão de equilíbrio até temperaturas baixas ($H = 0.3$), quanto na região em que é observada a reentrância ($H = 0.4$).

Apenas os gráficos das energias livres apresentam uma diferença real de comportamento nos dois casos, para $H = 0.3$. A energia livre do padrão de faixas é menor que a energia livre do estado ferromagnético em todo o intervalo de temperaturas, enquanto que para $H = 0.4$ as energias livres se encontram em $T \simeq 7.5$, explicitando o ponto onde ocorre a reentrância para este campo.

Toda esta análise elucidada de forma detalhada o papel de cada termo na composição da energia do sistema, mas não esclarece categoricamente o que realmente é responsável pela reentrância. Para isso, estenderemos nossa análise a dois outros modelos descritos por uma estrutura mais simplificada, os quais são definidos na sequência.

4.1 Modelos

4.1.1 Sharp-wall

Este é um perfil com paredes de domínio do tipo Ising, onde

$$m_j = \begin{cases} m_0 & \text{se } j \leq a \\ -m_0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.1)$$

Este perfil possui três parâmetros, a magnetização nos domínios m_0 , a posição da parede de domínio a e o período do padrão de faixas λ que, seguindo a definição usada no capítulo anterior, é dada por $\lambda = 2h$.

No modelo *sharp-wall* a energia livre é minimizada com relação a m_0 ; este parâmetro, a magnetização do sistema, assume apenas um valor, sendo positivo no semi-período adotado e negativo quando o padrão se repete.

4.1.2 Two-spin-wall

Neste modelo o domínio das paredes consiste de um acoplamento de spins os quais podem ajustar sua magnetização independentemente da magnetização de domínio, e pode ser definido como,

$$m_j = \begin{cases} m_0 & \text{se } j \leq a \\ m_1 & \text{se } j = a + 1 \\ -m_1 & \text{se } j = a + 2 \\ -m_0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.2)$$

Neste modelo é adicionado um novo parâmetro em comparação com o modelo *sharp-wall*, a magnetização dentro da parede de domínio m_1 , ou seja, este é um perfil com quatro parâmetros.

No modelo *two-spin-wall*, a energia livre é minimizada com relação a m_0 e m_1 . A magnetização do sistema pode assumir dois valores, um valor m_0 , o qual assume as configurações positiva e negativa tal como adotado no modelo *sharp-wall*, e um segundo valor

m_1 intermediário situado nas paredes de domínio, o qual também assume o valor negativo correspondente.

A figura 4.1 mostra os perfis representativos dos três modelos que foram estudados. Os perfis foram gerados para uma temperatura e um valor de campo fixo. Vemos que para o valor de campo escolhido ($H = 0.1$), a simetria do padrão de faixas já foi perdida. A linha com quadrados vermelhos ilustra o modelo *sharp-wall* e é possível observar que todas as magnetizações possuem o mesmo valor. A linha com círculos azuis ilustra o modelo *two-spin-wall* e mostra o parâmetro m_1 na parede de domínio que o diferencia do modelo *sharp-wall*. A curva com asteriscos pretos exibe o modelo completo, no qual os spins nas paredes de domínio variam com a mudança na temperatura.

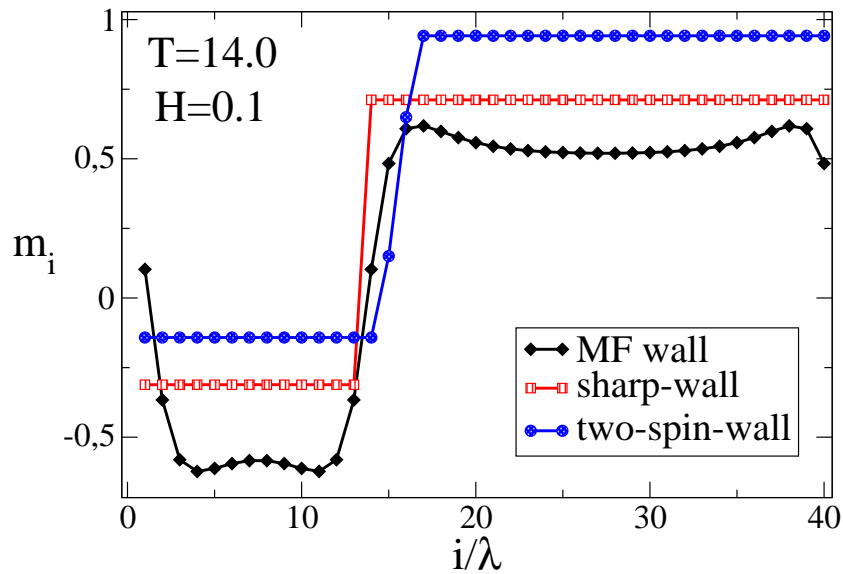


Figura 4.1: Perfil da magnetização dos três modelos estudados. As amplitudes foram deslocadas para ilustrar melhor a forma de cada perfil.

Seguindo a análise realizada para o modelo completo, nestes dois modelos minimizamos numericamente a energia livre do sistema com relação ao parâmetro de ordem, a magnetização local.

Em coerência com o estudo que fizemos com o modelo de campo médio no padrão de faixas assimétricas, nestes dois modelos também fixamos $\delta = 6.0$ em nossa análise. Assim, no programa fixamos $\delta = 6.0$ e, para um h , T e H fixos, fazemos uma varredura na assimetria das faixas, ou seja, analisamos a energia livre gerada em cada configuração de perfil possível ao semi-período h escolhido. Desta forma, obtemos o quão assimétrica é a faixa que gera a menor energia. Paralelamente, rodamos o programa que minimiza numericamente a energia livre do estado ferromagnético para a mesma temperatura T e campo H .

Com este procedimento, para uma T fixa vamos alterando H até obter H_c , ou seja, o campo magnético crítico no qual a energia livre de faixas passa a ser menor que a energia livre ferromagnética. De posse desta informação (H_c), para T e H fixos rodamos o programa que minimiza a energia de faixas para diferentes valores de h , de forma a obter o h que minimiza a energia livre do sistema.

Este procedimento foi realizado para ambos os modelos, *sharp-wall* em comparação com o estado ferromagnético e *two-spin-wall* também sendo comparado com o estado ferro.

4.2 Resultados: o papel das paredes de domínio

Por suas definições, estes dois modelos são bem mais simples; no modelo *sharp-wall* minimizamos a energia livre em função apenas de m_0 , e no modelo *two-spin-wall*, a minimização é feita em termos de m_0 e m_1 ; já em nosso modelo completo de campo médio, a minimização da energia livre é feita em relação a $2h (= \lambda)$ amplitudes de Fourier, daí o alto custo computacional. Por este motivo, com estes dois modelos simplificados, conseguimos alcançar valores bem maiores do comprimento de modulação λ .

4.2.1 Largura das faixas e assimetria

A figura 4.2 mostra a dependência da largura das faixas com o campo magnético H , para uma temperatura baixa ($T = 2$) à esquerda e uma temperatura relativamente alta ($T = 10$) à direita.

Nas duas temperaturas o comportamento qualitativo da largura das faixas é o mesmo, há a divergência em algum valor de campo crítico H_c .

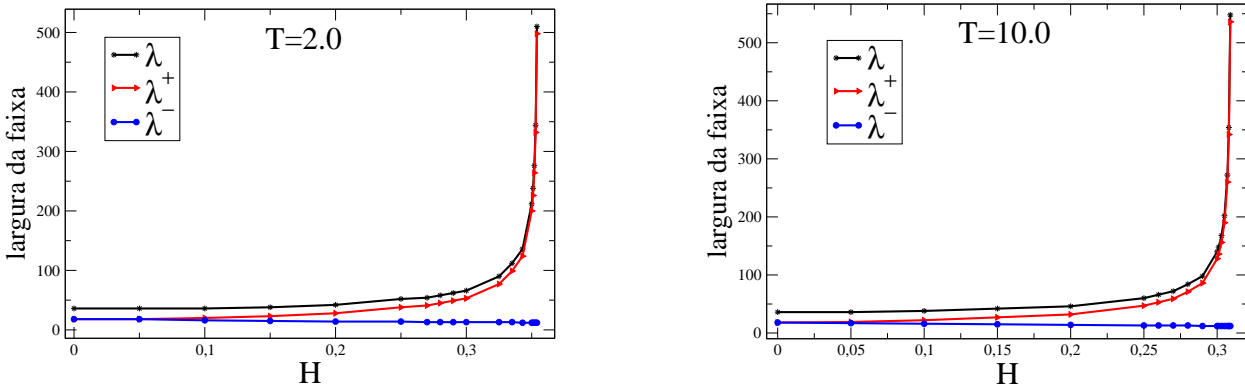


Figura 4.2: Modelo *sharp-wall*: Largura das faixas λ (asteriscos pretos), componentes positivos da magnetização λ^+ (triângulos vermelhos) e assimetria λ^- em função do campo magnético H , para $T = 2$ à esquerda e $T = 10$ à direita.

Em especial, podemos comparar a figura da esquerda, com a figura 3.8 onde obtemos a dependência da largura das faixas com o campo H para o modelo completo para $T = 2$. Nesta análise, conferimos que a divergência ocorre em $H \approx 0.345$, valor obtido para uma faixa de semi-período $h = 84$ (valor limite que conseguimos alcançar por limitações computacionais.).

No modelo *sharp-wall* obtemos que a divergência ocorre em $H \approx 0.354$, para uma faixa de semi-período $h = 255$. Para $T = 10$ a divergência ocorre em $H \approx 0.3$, para uma faixa de semi-período $h = 274$. Nas duas temperaturas os componentes positivos da magnetização λ^+ acompanham o comportamento divergente da largura das faixas e a assimetria λ^- vai a zero a partir de um certo valor a $H = 0$.

Mesmo comportamento observado na figura 4.3, onde são mostrados os gráficos que exibem a dependência da largura das faixas com H para o modelo *two-spin-wall* para duas temperaturas fixas $T = 2$ e $T = 10$. Em todos os casos, para $H > H_c$, uma solução homogeneamente magnetizada apresenta menor energia livre. Assim como no modelo completo, para estes dois modelos podemos concluir, deste comportamento divergente da largura das faixas, que a transição da fase modulada para o estado homogêneo se dá de forma contínua.

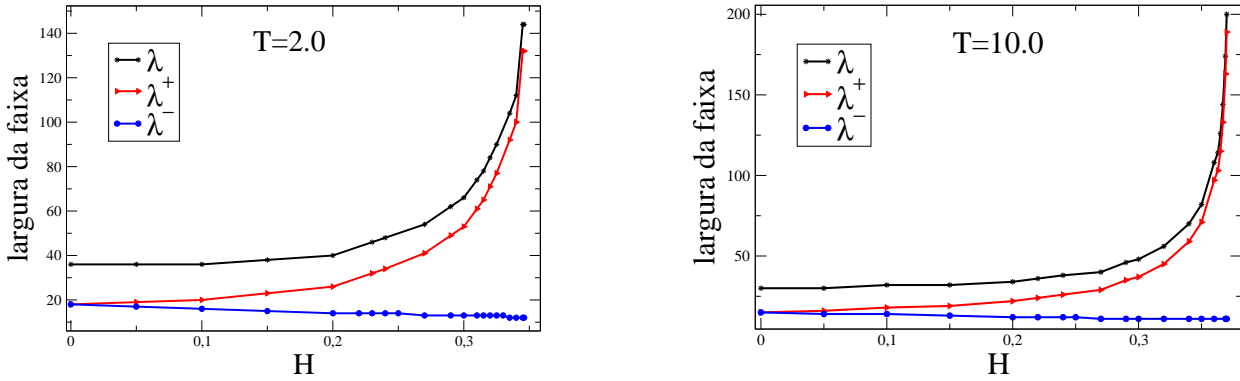


Figura 4.3: Modelo two-spin-wall: Largura das faixas λ (asteriscos pretos), componentes positivos da magnetização λ^+ (triângulos vermelhos) e assimetria λ^- em função do campo magnético H , para $T = 2$ à esquerda e $T = 10$ à direita.

4.2.2 Diagrama de fases

Nesta parte do trabalho resolvemos o diagrama de fases para a solução de faixas assimétricas no plano $H \times T$ para os três modelos estudados. Os resultados são mostrados na figura 4.4. Abaixo das três curvas a solução de equilíbrio do sistema é um padrão de faixas assimétricas com largura variável. A linha de transição em cada modelo é dada pelo campo crítico H_c , no qual a solução ferromagnética passa a exibir uma energia livre menor que a energia livre do padrão de faixas assimétricas, acima da linha crítica respectiva a cada modelo, a solução homogênea é a solução termodinâmica do sistema.

Como já esperávamos, a baixas temperaturas o comportamento dos três modelos é semelhante. Com o aumento da temperatura ($T \approx 4.0$) o campo crítico torna-se diferente para cada modelo. A curva com estrelas roxas corresponde à solução do modelo de campo médio, no qual a magnetização local é considerada um parâmetro variacional na minimização da energia livre, nela o comportamento reentrante é evidente como já havíamos observado em 3.9. Em contraste, o modelo *sharp-wall*, mostrado na linha com círculos verdes, não apresenta reentrância no diagrama de fases, a linha crítica decai monotonicamente.

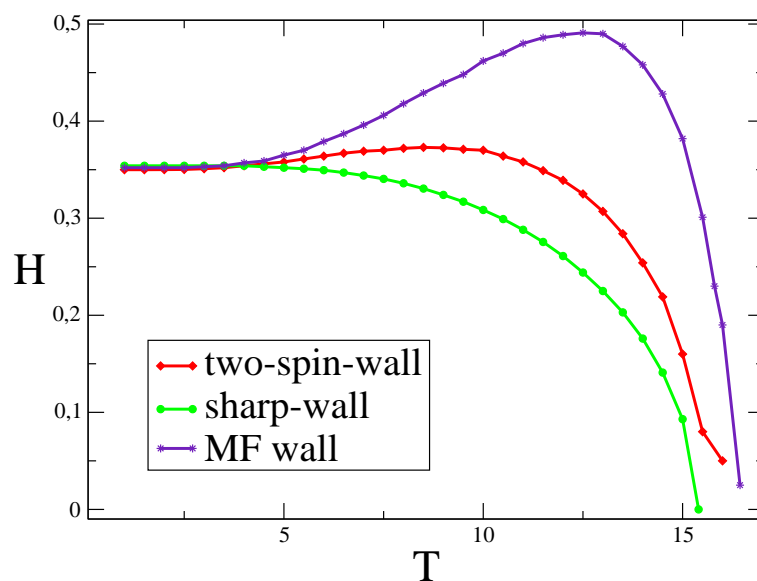


Figura 4.4: Diagrama de fases campo versus temperatura para os três modelos estudados para $\delta = 6.0$.

mente a partir de temperaturas baixas assumindo valores cada vez menores de H_c com o aumento da temperatura.

Como havíamos discutido antes, a baixas temperaturas o comportamento dos modelos estudados deve ser o mesmo, com o aumento de T , ou seja, indo de encontro à região onde efeitos térmicos influenciam fortemente a energia livre, o campo crítico do modelo de campo médio atinge um máximo bem acima dos outros modelos. O que estaria gerando esta diferença de comportamento?

O modelo *sharp-wall* possui a estrutura mais simples possível, uma única descontinuidade entre duas regiões opostamente saturadas. A nível de campo médio é fácil ver que estas paredes não irão influenciar na entropia do sistema. De forma oposta, no modelo completo, as paredes de domínio desenvolvem uma estrutura não trivial com o aumento da temperatura. A largura finita das paredes, mesmo em campo médio, é suficiente para induzir uma contribuição entrópica à energia livre. Assim, o que deve estar gerando esta diferença entre os modelos, para temperaturas mais altas, deve ser a estrutura das paredes

de domínio, pois é onde encontra-se a diferença entre eles e onde os graus de liberdade adicionais afetam a energia livre.

De modo a confirmar se esta conclusão está correta, analisamos um modelo intermediário, o qual difere do modelo *sharp-wall* em apenas um grau de liberdade, no modelo *two-spin-wall* as paredes de domínio são compostas por dois sítios, uma magnetização m_1 e seu respectivo valor negativo. Na curva com losangos vermelhos da figura 4.4 é possível observar que esta pequena mudança na estrutura das paredes já é o bastante para induzir uma pequena reentrância no diagrama de fases.

Com esta análise concluímos que a estrutura das paredes de domínio é essencial ao fenômeno da quebra de simetria inversa observado em filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular.

Na próxima seção analisaremos a energia livre dos modelos estudados, com foco nos dois extremos, comparando o modelo *sharp-wall* e o modelo completo juntamente com o estado homogêneo, bem como o comportamento de cada um dos termos que as compõem. Queremos saber qual a real contribuição de cada termo nas transições de fases.

4.2.3 Análise da energia livre

Nas figuras 4.5 e 4.6 é mostrada a dependência com o campo de cada um dos componentes da energia livre do sistema (energia, entropia e magnetização) e também da própria energia livre para a solução de faixas assimétricas do modelo de campo médio e *sharp-wall* junto com a solução homogênea para duas temperaturas fixas, $T = 2.0$ e $T = 10.0$.

Como já era esperado, a baixas temperaturas ($T = 2.0$) o modelo completo e o modelo *sharp-wall* apresentam o mesmo comportamento, pois nesta região os efeitos térmicos são negligenciáveis. Isto pode ser observado em particular no gráfico (c) da figura 4.5, onde a entropia apresenta um valor praticamente nulo nos dois modelos. O gráfico (d) na mesma figura exhibe o resultado esperado a partir do obtido em [6], a magnetização apresenta um comportamento contínuo na transição entre a fase modulada e a fase homogênea, indicado pela divergência na largura das faixas em um valor crítico do campo. Assim, a magnetização cresce continuamente de um valor $m = 0$ em $H = 0$ até $m = 1$ em $H = H_c$.

Com o aumento da temperatura ($T = 10.0$) os efeitos térmicos se tornam evidentes, a principal diferença entre os modelos pode ser observada no gráfico (c) da figura 4.6. A curva com círculos pretos ilustra o perfil da entropia para o modelo de campo médio, é visível o quanto maior é a entropia deste modelo em comparação com a entropia do modelo *sharp-wall* mostrada na curva com estrelas vermelhas. Esta diferença se dá, provavelmente, devido a estrutura das paredes de domínio em cada um dos modelos, pois no modelo *sharp-wall* não são admitidos graus de liberdade nas paredes de domínio. Em particular, para pequenos valores de campo, a entropia superior do modelo completo garante uma menor energia livre.

O gráfico (d) da mesma figura mostra a magnetização em função do campo, deste vemos que a magnetização do modelo *sharp-wall* torna-se maior que a magnetização do modelo de campo médio para campos próximos ao limite de estabilidade, mas este ganho na magnetização não é o bastante para reduzir a energia livre do modelo *sharp-wall* e equilibrar com a do modelo completo que, mesmo a altas temperaturas, é dominada pelas contribuições da energia e da entropia nos dois modelos.

Como podemos concluir das curvas da energia livre e da magnetização, curvas (a) e (d), a transição da fase modulada para a fase homogênea é contínua, assim como observamos a $T = 2$. Em um valor de campo crítico, $H_c \approx 0.46$, a largura das faixas diverge tal como a baixas temperaturas.

Em tese, a menor energia livre do modelo de campo médio quando comparada com a energia livre do modelo *sharp-wall* é consequência do efeito da combinação dos termos de energia e entropia em cada modelo. Para pequenos campos, observamos em 4.6 (b) que, antes das energias dos modelos completo e *sharp-wall* se cruzarem ($H \approx 0.25$), o excesso de entropia é importante na redução da energia livre, depois do cruzamento a contribuição da energia é a responsável por esta redução. Como resultado destas contribuições a linha de transição no modelo completo é observada a campos maiores.

Nossos resultados referentes à análise do sistema com campo externo, obtidos nos três modelos estudados, foram publicados no jornal Physical Review B: "Inverse transition in the dipolar frustrated Ising ferromagnet: The role of domain walls", volume 90, número 21.

URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.214408>

DOI: 10.1103/PhysRevB.90.214408

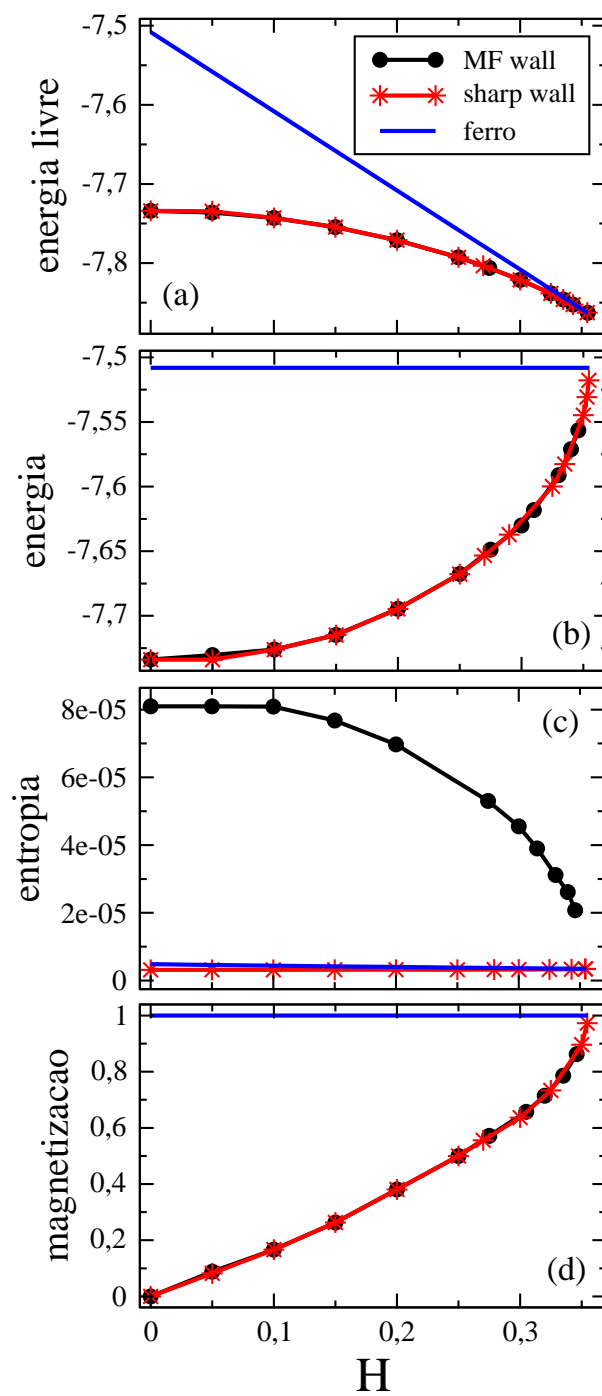


Figura 4.5: Energia livre (a), energia (b), entropia (c) e magnetização (d) em função do campo magnético aplicado em $T = 2.0$.

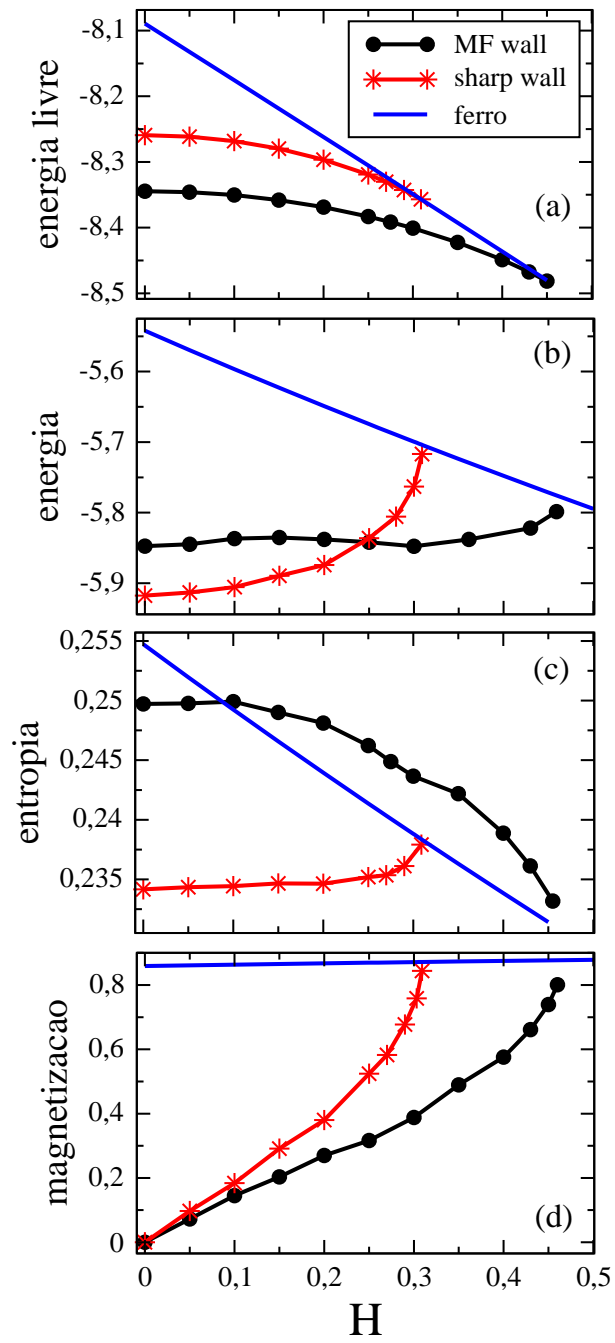


Figura 4.6: Energia livre (a), energia (b), entropia (c) e magnetização (d) em função do campo magnético aplicado em $T = 10.0$.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho estudamos um ferromagneto de Ising com anisotropia perpendicular na presença de um campo externo.

No primeiro momento de nosso estudo, analisamos um modelo de Ising em uma rede quadrada sem o efeito de um campo magnético aplicado, e observamos que a isotropia do sistema é quebrada por um padrão de equilíbrio com a estrutura de faixas simétricas. Neste estudo observamos que, ao nos aproximarmos da linha crítica no diagrama $T_c \times \delta$, o sistema apresenta várias soluções metaestáveis com diferentes larguras, em concordância com o observado por Piguín e Cannas em [4], onde eles observaram que nesta região aparecem faixas com larguras diferentes, as quais eles chamaram de estados híbridos.

Também foi possível observar nesta análise o rápido crescimento de h próximo a linha de transição, já indicando um comportamento divergente na largura das faixas. Observamos que a dependência de h com δ se dá de forma exponencial, e para grandes valores de δ , o h de equilíbrio obedece à relação $h(\delta) \sim e^{\delta/2}$.

O perfil deste padrão exibe uma forma tipo onda quadrada a baixas temperaturas, assumindo uma forma senoidal com amplitudes cada vez menores com o aumento da temperatura, até que em T_c a amplitude de modulação vai a zero e é observado uma transição contínua a um estado homogêneo.

No segundo momento de nosso trabalho aplicamos um campo magnético homogêneo ao sistema com o objetivo de analisar o interessante comportamento reentrante observado

na estabilidade de fases magnéticas. Mostramos que esta quebra de simetria inversa em filmes ferromagnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular ocorre como consequência dos graus de liberdade adicionais na estrutura das paredes de domínio.

Comparamos o diagrama de fases de três modelos, um modelo de campo médio no qual a estrutura das paredes varia com a temperatura, um modelo *sharp-wall* onde os spins nas paredes de domínio não são admitidos e um modelo intermediário, *two-spin-wall*, onde é admitido um grau de liberdade adicional nas paredes de domínio. Quando comparamos o modelo de campo médio com o modelo *sharp-wall*, a estrutura nas paredes de domínio do modelo completo levou à uma entropia maior, explicitando a importância dos graus de liberdade internos na redução da energia livre. Além disso, nossos resultados mostram que o modelo com paredes *sharp* não apresenta reentrância.

Por outro lado, vimos que a estrutura das paredes de domínio não afeta a dependência do período das faixas com o campo magnético, visto que os três modelos exibem uma divergência na largura das faixas na transição. Além disso, nossos resultados para o modelo de campo médio indicam que a linha crítica em todo o intervalo de temperaturas é uma linha de transições contínuas.

Para testar a importância dos graus de liberdade internos na transição inversa, adicionamos um grau de liberdade ao modelo *sharp-wall*, e os resultados mostraram que isto já é o bastante para induzir uma transição inversa, a qual está totalmente ausente no modelo *sharp-wall*.

No diagrama de fases é visto que a transição inversa ocorre para campos cada vez menores com a redução da temperatura de forma gradativa ponto a ponto até que, em torno de $T \approx 5.0$, o campo crítico permanece aproximadamente constante até temperaturas baixas. À medida que a temperatura aumenta, o domínio das paredes alcança uma estrutura e largura finita levando ao aumento da entropia, isto induz uma energia livre menor e portanto um campo magnético mais intenso é necessário para levar à transição para a fase homogênea.

Seria interessante poder testar estas conclusões em modelos em que a estrutura das paredes de domínio seja realista, como por exemplo, estudar um modelo com spins de Heisenberg. Também seria importante completar o diagrama de fases incluindo o padrão de bolhas. Experimentalmente, quantificar a extensão do fenômeno da reentrância em filmes finos e a influência desta na estabilidade dos domínios magnéticos.

Apêndice A

Energia livre variacional de campo médio

Na aproximação de campo médio, para implementar o método variacional, propomos uma matriz densidade de prova para a matriz densidade ρ em função de parâmetros livres a serem determinados.

Em um modelo de Ising os spins podem assumir os valores $\sigma = \pm 1$, ou seja, estes podem assumir dois estados.

Como parâmetro de ordem, uma forma possível a ser assumida é

$$S_i^1 = 2\delta_{\sigma_i,1} - 1, \quad (\text{A.1})$$

onde o fator 2 é o número de estados, e escolhemos o estado 1 para ser tratado, esta escolha não compromete a generalidade do problema pois o estado fundamental é degenerado, assim $m_i = \langle S_i^1 \rangle$.

As matrizes densidade de partícula única estão sujeitas aos vínculos,

$$\sum_{S_i=\pm 1} \rho_i = 1 \quad \text{e} \quad \sum_{S_i=\pm 1} S_i \rho_i = m_i. \quad (\text{A.2})$$

Por ser uma variável discreta e possuir dois vínculos, uma possível matriz densidade de prova a ser proposta é $\rho_i = a + b\delta_{\sigma_i,1}$. Aplicando os vínculos a esta expressão e assumindo a notação de variáveis de Ising, obtemos

$$\rho_i = \frac{1}{2}(1 + S_i m_i). \quad (\text{A.3})$$

Esta é a densidade de probabilidade a ser usada para obter a energia livre variacional de campo médio F_ρ , escrita na forma

$$\begin{aligned} F_\rho &= \langle \mathcal{H} \rangle_{\rho_i} + T \sum_{\alpha} \text{Tr} \rho_{\alpha} \ln \rho_{\alpha} \\ &= \frac{1}{N} \text{Tr} \rho_i \mathcal{H} + \frac{1}{\beta N} \sum_i \text{Tr} \rho_i \ln \rho_i , \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

com \mathcal{H} escrito na forma,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i . \quad (\text{A.5})$$

Aplicando (A.3) e (A.5) em (A.4), resolveremos os dois termos em separado,

$$I \rightarrow \text{Tr} \rho_i \mathcal{H} = \sum_{S_i} \sum_{S_j} (\rho_i \rho_j) \left(-\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \right) . \quad (\text{A.6})$$

Somando a todos os possíveis estados de spin, $S_i = \pm 1$, obtemos como resultado para este termo

$$I \rightarrow -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j - \sum_i h_i S_i . \quad (\text{A.7})$$

O segundo termo na expressão (A.4), pode ser escrito na forma

$$II \rightarrow \frac{1}{\beta N} \sum_i \text{Tr} \rho_i \ln \rho_i = \sum_{S_i} \sum_i \frac{1}{2} (1 + S_i m_i) \ln \left(\frac{1}{2} (1 + S_i m_i) \right) , \quad (\text{A.8})$$

com $\beta = 1/k_B T$, onde tomamos $k_B = 1$. Deste termo obtemos como resultado,

$$II \rightarrow \frac{1}{2} \left(\sum_i (1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i) \right) - \ln 2 . \quad (\text{A.9})$$

Com isto, a energia livre (A.4) para nosso sistema assume a forma,

$$\begin{aligned} F_{MF} &= -\frac{1}{2N} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j - \frac{1}{2N} \sum_i h_i m_i \\ &+ \frac{T}{2N} \sum_i (1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i) - T \ln 2 . \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Simulated Annealing

A *NMinimize* é uma função do Mathematica de Wolfram que executa vários algoritmos para encontrar o mínimo global do sistema. Este método é bastante flexível ao lidar com funções que não são diferenciáveis ou possuem alguma descontinuidade.

Muitas vezes, encontrar um mínimo global pode ser difícil, assim, para que o *NMinimize* comece a trabalhar, é necessário definir uma região a partir da qual se deseja iniciar. A região inicial é definida atribuindo-se a cada variável limites superior e inferior; se estes limites não forem definidos, é usada uma região inicial padrão de $-1 \leq x \leq 1$. Cada variável pode ter a região inicial definida de forma diferente.

Para melhores resultados, é possível definir para esta função vários métodos de otimização, tais como "*Differential Evolution*", "*Nelder Mead*", "*Simulated Annealing*", etc.

A figura B.1 mostra um trecho do programa que utilizamos para obter os resultados para o padrão de faixas assimétricas. Com o uso da função *NMinimize*, minimizamos a energia livre do sistema com respeito a magnetização, que é nosso parâmetro variacional. Usamos como método de otimização o *Simulated Annealing* por ser o que melhor se enquadra na solução deste tipo de sistemas.

Simulated Annealing é um método probabilístico que procura o mínimo global de uma função que possui vários mínimos locais. Este método é motivado pelo processo físico de recozimento, em que um objeto de metal é aquecido a uma temperatura elevada e deixado esfriar lentamente. Este processo permite que a estrutura atômica do metal transite a um

```

Do[Print[H, NMinimize[Join[{FreeE[Mag]}, Table[-0.99999999 < Mag[[i]] < 0.99999999, {i, 1, Length[Mag]}]], Mag,
Method -> {"SimulatedAnnealing", "PerturbationScale" -> 2, "SearchPoints" -> 100, "Tolerance" -> 0.001,
"InitialPoints" -> Join[Table[Flatten[Join[Table[-0.9999, {i, 1, h - k}], Table[0.9999, {i, h - k + 1, 2 h}]]], {k, 0, h - 1}],
"RandomSeed" -> RandomInteger[{0, 100}]]], {i, 0, 0}]

```

Figura B.1: Comando utilizado para minimização da energia livre do padrão de faixas assimétricas.

estado de menor energia tornando, assim, este um metal mais resistente.

A partir de uma condição inicial, o método calcula aleatoriamente uma nova solução no espaço de soluções possíveis do sistema. Se a energia desta nova configuração for menor, esta passa a ser nossa condição atual, se a energia for maior, ainda há uma probabilidade desta configuração ser aceita como nova condição, e esta probabilidade é tão maior quanto maior for o parâmetro de temperatura definido pelo método ou quanto menor for a diferença de energia entre duas configurações. Esta possibilidade de aceitação é o que permite que o sistema não fique preso em mínimos locais.

De acordo com as necessidades é possível definir alguns parâmetros para que os resultados sejam mais confiáveis. Em nosso estudo definimos:

- *PerturbationScale* → define o "tamanho do salto" onde será calculada a nova configuração, ou seja, a escala de perturbação, se for muito pequeno, o sistema fica preso, se for muito grande, podemos perder alguns mínimos.
- *SearchPoints* → define o número de estados a serem visitados em cada iteração.
- *Tolerance* → é a probabilidade de aceitação de uma configuração com energia maior do que a anterior.
- *InitialPoints* → conjunto de pontos iniciais.
- *RandomSeed* → ponto de partida para o gerador de números aleatórios.

Referências Bibliográficas

- [1] SARATZ, N.; LICHTENBERGER, A.; PORTMANN, O.; RAMSPERGER, U.; VINDIGNI, A.; PESCIA, D. *Phys. Rev. Lett.*, v. 104, p. 077203, 2010.
- [2] SARATZ, N.; RAMSPERGER, U.; VINDIGNI, A.; PESCIA, D. *Phys. Rev. B*, v. 82, p. 184416, 2010.
- [3] CANNAS, S.; CARUBELLI, M.; BILLONI, O.; STARIOLO, D. Inverse transition in a two-dimensional dipolar frustrated ferromagnet. *Phys. Rev. B*, v. 84, p. 014404, 2011.
- [4] PIGHIN, S. A.; CANNAS, S. A. Phase diagram of an ising model for ultrathin magnetic films: Comparing mean field and monte carlo predictions. *Phys. Rev. B*, v. 75, p. 224433, 2007.
- [5] GAREL, T.; DONIACH, S. Phase transitions with spontaneous modulation - the dipolar ising ferromagnet. *Phys. Rev. B*, v. 26, p. 325–329, 1982.
- [6] JOHANSEN, T. H.; PAN, A. V.; GALPERIN, Y. M. *Phys. Rev. B*, v. 87, p. 060402(R), 2013.
- [7] DÍAZ-MÉNDEZ, R.; R.MULET. *Phys. Rev. B*, v. 81, p. 184420, 2010.
- [8] PORTMANN, O.; GOLZER, A.; SARATZ, N.; BILLONI, O.; PESCIA, D.; VINDIGNI, A. *Phys. Rev. B*, v. 82, p. 184409, 2010.
- [9] PORTMANN, O.; VATERLAUS, A.; PESCIA, D. *Nature*, London, v. 422, p. 701, 2003.

- [10] CANNAS, S.; STARIOLO, D.; TAMARIT, F. *Phys. Rev. B*, v. 69, p. 092409, 2004.
- [11] NICOLAU, L.; STARIOLO, D. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 054453, 2007.
- [12] KIVELSON, S.; FRADKIN, E.; EMERY, V. *Nature*, London, v. 393, p. 550, 1998.
- [13] GROUSSON, M.; TARJUS, G.; P.VIOT. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 036109, 2001.
- [14] MALESCIO, G.; PELLICANE, G.; P.VIOT. *Phys. Rev. E*, v. 70, p. 021202, 2004.
- [15] IMPERIO, A.; REATTO, L. *The Journal of Chemical Physics*, v. 124, p. 164712, 2006.
- [16] OSTERMAN, N.; BABIC, D.; POBERAJ, I.; DOBNIKAR, J.; ZIHERL, P. *Phys. Rev. Lett.*, v. 99, p. 248301, 2007.
- [17] GLASER, M. A.; GRASON, G. M.; KAMIEN, R. D.; KOSMRLJ, A.; SANTANGELO, C. D.; ZIHERL, P. *Europhysics Letters*, Les Ulis, v. 78, p. 46004, 2007.
- [18] BERG, E.; FRADKIN, E.; KIVELSON, S.; TRANQUADA, J. *New J. Phys.*, v. 11, p. 115004, 2009.
- [19] TRIPP, S. L.; PUSZTAY, S. V.; RIBBE, A. E.; WEI, A. Self-assembly of cobalt nanoparticle rings. *J. Am. Chem. Soc.*, v. 124, p. 7914–7915, 2002.
- [20] GEHRING, G. A.; KESKIN, M. The temperature dependence of the domain spacing in ultrathin magnetic films. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 5, p. L581, 1993.
- [21] STOYCHEVA, A. D.; SINGER, S. J. Scaling theory for two-dimensional systems with competing interactions. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 016118, 2001.
- [22] WON, C.; WU, Y. Z.; CHOI, J.; KIM, W.; SCHOLL, A.; DORAN, A.; OWENS, T.; WU, J.; JIN, X. F.; ZHAO, H. W.; QIU, Z. Q. Magnetic stripe melting at the spin reorientation transition in $\text{Fe/Cu}(001)$. *Phys. Rev. B*, v. 71, p. 224429, 2005.

- [23] PORTMANN, O.; VATERLAUS, A.; PESCIA, D. Observation of stripe mobility in a dipolar frustrated ferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, p. 047212, 2006.
- [24] SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 046107, 2005.
- [25] CRISANTI, A.; LEUZZI, L. *Phys. Rev. Lett.*, v. 95, p. 087201, 2005.
- [26] SELLITTO, M. *Phys. Rev. B*, v. 73, p. 180202(R), 2006.
- [27] PAOLUZZI, M.; LEUZZI, L.; CRISANTI, A. *Phys. Rev. Lett.*, v. 104, p. 120602, 2010.
- [28] THOMAS, C. K.; KATZGRABER, H. G. *Phys. Rev. E*, v. 84, p. 040101, 2011, URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.84.040101>.