



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Matheus Grossklags

**DIAGRAMA DE FASES DE SISTEMAS MAGNÉTICOS COM  
INTERAÇÃO DE DZYALOSHINSKII-MORIYA**

Florianópolis  
2020

Matheus Grossklags

**DIAGRAMA DE FASES DE SISTEMAS MAGNÉTICOS  
COM INTERAÇÃO DE DZYALOSHINSKII-MORIYA**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Alejandro Mendoza Coto,  
Dr.

Florianópolis  
2020

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,  
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Grossklags, Matheus

Diagrama de fases de sistemas magnéticos com interação  
de Dzyaloshinskii-Moriya / Matheus Grossklags ;  
orientador, Alejandro Mendoza Coto, 2020.

80 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa  
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas,  
Programa de Pós-Graduação em Física, Florianópolis, 2020.

Inclui referências.

1. Física. 2. Matéria condensada. 3. Skyrmions. 4.  
Derretimento de sistemas bidimensionais. 5. Transições de  
fase topológicas. I. Mendoza Coto, Alejandro. II.  
Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós  
Graduação em Física. III. Título.

Matheus Grossklags

**DIAGRAMA DE FASES DE SISTEMAS MAGNÉTICOS COM  
INTERAÇÃO DE DZYALOSHINSKII-MORIYA**

O presente trabalho em nível de mestrado foi avaliado e aprovado por banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Lucas Nicolao, Dr.  
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Nilton da Silva Branco, Dr.  
Universidade Federal de Santa Catarina

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi julgado adequado para obtenção do título de Mestre em Física.

---

Prof. Ivan Helmuth Bechtold, Dr.  
Coordenador do Programa

---

Prof. Alejandro Mendoza Coto, Dr.  
Orientador

Florianópolis, 17 de julho de 2020.



*Dedico este trabalho a todos que o lerem.*

# AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer aos pilares que formam a base estrutural da minha vida, ao meu pai *Renê*, a minha mãe *Nádia* e ao meu irmão *Nicholas*. Gostaria de agradecer por toda ajuda e suporte que vocês me deram. Por estarem sempre ao meu lado, compartilhando bons momentos, e me dando suporte emocional em tempos difíceis. Não há palavras que possam descrever o amor que sinto por vocês. Por fim, gostaria de agradecer do fundo do meu coração, por vocês terem acreditado em mim e por terem transformado o meu sonho, no sonho de vocês. Obrigado.

Gostaria de agradecer a toda minha família, em especial meu primo *Giovanny*, por ter me acolhido em Florianópolis a oito anos atrás, ter me ajudado nesta difícil transição que é sair de casa e morar sozinho, e pela reflexão política e pessoal que você me proporcionou. A minha tia *Edileny*, por todos os seus ensinamentos e aos meus primos *Gabriel*, *Guilherme* e *Gustavo* pelas suas respectivas amizades.

Ao suporte incondicional de todos os meus amigos de Jaraguá do Sul. Em especial *Black*, *Xita*, *Vitão*, *Gustavão*, *Luís*, *Arthur Englert*, *Arthurzão*, *Daniboy*, *Jean*, *Albano*, *Krutzsch*, *Gaeski*, *Tripa*, *Fedo*, *Kauê*, *Ismar* e *Marcelinho*. Pelos momentos e risadas que compartilhamos, pelo trajeto que percorremos e pela jornada que ainda nos aguarda. Obrigado.

Gostaria também de agradecer aos amigos que fiz durante a minha graduação em física, *Matheus*, *Leonardo* e *Henrique*. Pelas experiências profissionais e pessoais que compartilhamos. Obrigado.

Agradeço ao meu orientador *Alejandro Mendoza Coto*. Por ter aceitado compartilhar esta jornada comigo, pelos seus ensinamentos, paciência e determinação na busca de excelência. Por fim, agradeço a disponibilidade da banca para a avaliação deste trabalho, e pelo programa *CAPES/FAPESC* pelo financiamento deste projeto.

*“Twenty years from now you will be more disappointed by the things that you didn’t do than by the ones you did do. So throw off the bowlines. Sail away from the safe harbor. Catch the trade winds in your sails. Explore. Dream. Discover.”*

*Mark Twain*

# RESUMO

Neste trabalho, apresentamos um estudo sobre as propriedades do diagrama de fases de sistemas magnéticos bidimensionais com interação de troca ferromagnética e de Dzyaloshinskii-Moriya, cuja competição é responsável pela formação de padrões de magnetização não triviais. Utilizando o método de campo médio variacional, identificamos as fases desenvolvidas pelo sistema e como estas modificam-se através da variação de parâmetros microscópicos do modelo, bem como de parâmetros externos como a temperatura, campo magnético aplicado e anisotropia. Em seguida, mediante a adaptação da teoria *KTHNY* ao nosso modelo, analisamos as fases topológicas que o nosso sistema pode desenvolver e construímos o seu diagrama de fases topológico. A partir desta análise, identificamos a natureza da ordem orientacional e posicional das diferentes texturas magnéticas do sistema. O nosso estudo mostra que para além da identificação qualitativa das fases helicoidais e de skyrmions, o sistema desenvolve dentro dessas regiões fases termodinâmicas caracterizadas pela quebra específica de determinadas simetrias.

**Palavras-chaves:** Matéria Condensada. Campo Médio Variacional. Interação de Dzyaloshinskii-Moriya. Skyrmions. Derretimento de Sistemas Bidimensionais. Transição de Fase Topológica.

# ABSTRACT

In this work, we present a comprehensive study about the properties of the phase diagram in a two-dimensional magnetic system, where the interplay between the magnetic exchange interaction and the Dzyaloshinskii-Moriya interaction gives rise to non-trivial modulated structures, known as the helical and skyrmion patterns. We apply a variational mean-field method to study how this modulated structures are distributed in a phase diagram, varying parameters such as the temperature, magnetic field and anisotropy. Following this analysis, we look at the *KTHNY* scenario to study the topological properties of this system, where we identify the nature of the positional and orientational order in this modulated structures. This investigation allows the determination of the topological phase diagram in this system, where we distinguish regions by their symmetries.

**Key-words:** Condensed Matter Physics. Variational Mean-Field. Dzyaloshinskii-Moriya Interaction. Skyrmions. Two-Dimensional Melting. Topological Phase Transition.

# LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – A reflexão especular é uma transformação comum utilizada para testar a quiralidade dos objetos. Os objetos são <b>(a)</b> quirais quando suas imagens não podem ser sobrepostas e <b>(b)</b> não quirais quando suas imagens podem ser sobrepostas [1]. . . . .	14
Figura 2 – Representação gráfica de uma estrutura de três domínios magnéticos, separados por duas paredes de domínio de Néel. <b>(a)</b> o vetor magnetização é rotacionado de 0 a $\pi$ e depois $2\pi$ . Neste tipo de estrutura o índice topológico do sistema é $n = 1$ . Para o caso <b>(b)</b> em que o vetor magnetização é rotacionado de 0 a $\pi$ e depois 0, o índice topológico é $n = 0$ . . . . .	15
Figura 3 – Exemplo de uma textura magnética helicoidal <b>(a)</b> simulada em uma dimensão ressaltando o seu comportamento de hélice [2] e <b>(b)</b> observada experimentalmente no $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$ através da microscopia de Lorentz [3].	15
Figura 4 – <b>(a-b)</b> Textura magnética de um <i>skyrmion</i> em um ferromagneto em duas dimensões com anisotropia magnética uniaxial ao longo de um eixo vertical ao plano. O vetor magnetização perpendicular ao plano possui sentido positivo nas bordas, enquanto que no centro possui sentido negativo. Movendo-se ao longo de um diâmetro <b>(a)</b> a magnetização rotaciona de $2\pi$ sobre um eixo perpendicular ao diâmetro <b>(b)</b> e por $2\pi$ em torno do diâmetro o que corresponde a diferentes orientações do vetor de Dzyaloshinskii-Moriya [4]. <b>(c)</b> Microscopia de imagem de Lorentz ( <i>Lorentz TEM</i> ) de uma rede de <i>skyrmions</i> no $Fe_{1-x}Co_xSi$ [3].	16
Figura 5 – Diagrama de fases experimental de um sistema magnético quiral ( $Cu_2OSeO_3$ ) em que a existência da interação de Dzyaloshinskii-Moriya foi comprovada [5]. A amostra foi estudada em três dimensões (diagrama superior) e duas dimensões (diagrama inferior). . . . .	17
Figura 6 – Diagrama de fases topológico de um sistema magnético em duas dimensões a partir de resultados <b>(a)</b> experimentais de uma amostra de $Cu_2OSeO_3$ [6] e <b>(b)</b> simulados em um modelo clássico de spins de Heisenberg com interação de <i>DM</i> [7]. . . . .	18
Figura 7 – Estruturas moduladas geradas com o microscópio de corrente de tunelamento ( <i>STM</i> ) a partir da deposição <b>(a)</b> de <i>Co</i> em <i>Au(111)</i> [8], <b>(b)</b> de <i>Fe</i> em <i>W(110)</i> [9] e <b>(c)</b> de <i>In</i> em <i>Si(111)</i> [10]. Imagens editadas e retiradas da referência [11]. . . . .	21
Figura 8 – Texturas magnéticas de <b>(a)</b> faixas e <b>(b)</b> bolhas em um filme fino de $Gd_3Ga_5O_{12}$ [12]. . . . .	22

Figura 9 – Ordenamento dos momentos magnéticos de um sistema (a) ferro-magnético e (b) antiferromagnético. . . . .	23
Figura 10 – A definição do vetor de Dzyaloshinskii-Moriya depende de considerações de simetria entre spins vizinhos $\mathbf{S}_i$ e $\mathbf{S}_j$ representados pelos pontos $A$ e $B$ . O ponto $C$ é bissetor à linha $AB$ . . . . .	26
Figura 11 – Plot do funcional entropia (2.28) em relação ao módulo da magnetização do sistema. . . . .	31
Figura 12 – Imagem qualitativa de uma deslocação em uma textura magnética de faixas, retirada e editada da referência [13]. . . . .	36
Figura 13 – Vetor de Burger em uma rede triangular [14]. . . . .	39
Figura 14 – Gráfico de densidade da magnetização em $\hat{z}$ (mapa de cores) bem como o fluxo da magnetização no plano em aproximação de modo único ( $n=1$ ) com $c_0 = 0$ , $c_1 = d_1 = 0.5$ e $k_0 = 1$ . . . . .	51
Figura 15 – Padrão triangular demonstrando as diferentes possibilidades de combinações dos vetores de onda para um número de modos com $n = 10$ [15], onde consideramos o caso em que $c_{lm} = d_{lm}$ . Aqui a contagem de harmônicos relevantes é realizada da esquerda para a direita (partindo de $c_0$ ) em ordem de surgimento. . . . .	53
Figura 16 – Gráfico de densidade da magnetização para a solução de <i>skyrmions</i> em $\hat{z}$ (mapa de cores) bem como o fluxo da magnetização no plano em aproximação de modo único com $c_0 = 0$ , $c_1 = d_1 = 0.5$ e $k = 1$ . . . . .	55
Figura 17 – Exemplo qualitativo de como os pontos são escolhidos juntamente com a iteração a ser realizada. Quanto maior for a resolução escolhida para desenhar o diagrama, melhor será o resultado da linha crítica. . . . .	57
Figura 18 – Diagrama de fases teste para $b = 0$ e $\alpha = 0.2$ onde a região <b>I</b> representa a fase helicoidal, <b>II</b> a fase de <i>skyrmions</i> e <b>III</b> a fase homogênea. Os pontos vermelhos (círculos) no diagrama representam a linha crítica gerada pela expansão de cinco modos de Fourier ( $n = 5$ ) enquanto que os pontos azuis (quadrados) representam a expansão para dez modos ( $n = 10$ ). . . . .	59
Figura 19 – Dados da linha crítica entre a fase homogênea e a fase de <i>skyrmions</i> (a) energia livre em relação ao número de modos (b) campo crítico em relação ao número de modos. . . . .	59
Figura 20 – Diagrama de fases para $T = 0.01$ com parâmetro livre (a) $\alpha = 0.2$ , (b) $\alpha = 0.6$ e (c) $\alpha = 1.0$ . A região <b>I</b> representa a fase helicoidal, <b>II</b> a fase de <i>skyrmions</i> , <b>III</b> a fase homogênea e por fim, <b>IV</b> a fase inclinada. . . . .	60
Figura 21 – Diagrama de fases para o parâmetro $\alpha = 0.2$ com anisotropia (a) $b = -0.3$ , (b) $b = 0$ e (c) $b = 0.3$ . A região <b>I</b> representa a fase helicoidal, <b>II</b> a fase de <i>skyrmions</i> e <b>III</b> a fase homogênea. . . . .	62

Figura 22 – Diagrama de fases reentrante em $\alpha = 0.2$ para (a) $b = 0.55$ e (b) $b = 0.65$ . A região <b>II</b> representa a fase de <i>skyrmions</i> , <b>III</b> a fase homogênea e <b>IV</b> a fase inclinada. . . . .	63
Figura 23 – Diagrama de fases para o parâmetro $\alpha = 0.2$ com anisotropia (a) $b = -0.3$ (b) $b = 0$ e (c) $b = 0.3$ . . . . .	70
Figura 24 – Diagrama de fases para anisotropia $\tilde{b} = -0.3$ com parâmetro (a) $\alpha = 0.2$ (b) $\alpha = 0.6$ e (c) $\alpha = 1.0$ . . . . .	71
Figura 25 – Diagrama de fases reentrante para (a) $b = 0.55$ e (b) $b = 0.65$ . . . . .	71



# SUMÁRIO

	<b>Lista de figuras . . . . .</b>	<b>9</b>
<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>TEORIA GERAL . . . . .</b>	<b>21</b>
<b>2.1</b>	<b>Interações Competitivas . . . . .</b>	<b>21</b>
2.1.1	Interação de Troca . . . . .	24
2.1.2	Anisotropia . . . . .	24
2.1.3	Interação de Dzyaloshinskii-Moriya . . . . .	25
<b>2.2</b>	<b>Campo Médio Variacional . . . . .</b>	<b>27</b>
<b>2.3</b>	<b>Transições de Fase . . . . .</b>	<b>32</b>
2.3.1	Transição de Fase de Primeira Ordem e Contínua . . . . .	33
2.3.2	Transições de Fase Topológicas . . . . .	34
<b>2.4</b>	<b>Derretimento de sistemas bidimensionais . . . . .</b>	<b>35</b>
2.4.1	Estudo do derretimento de um sistema de faixas . . . . .	36
2.4.2	Estudo do derretimento de uma rede triangular . . . . .	38
<b>3</b>	<b>FUNCIONAL ENERGIA LIVRE . . . . .</b>	<b>41</b>
<b>3.1</b>	<b>Modelo Contínuo . . . . .</b>	<b>41</b>
<b>3.2</b>	<b>Adimensionalização . . . . .</b>	<b>44</b>
<b>4</b>	<b>FASES E MODULAÇÕES . . . . .</b>	<b>48</b>
<b>4.1</b>	<b>Fase Homogênea . . . . .</b>	<b>48</b>
<b>4.2</b>	<b>Fase Inclinada . . . . .</b>	<b>49</b>
<b>4.3</b>	<b>Fase Helicoidal . . . . .</b>	<b>50</b>
<b>4.4</b>	<b>Fase de Skyrmions . . . . .</b>	<b>52</b>
<b>4.5</b>	<b>Temperatura Crítica . . . . .</b>	<b>55</b>
<b>4.6</b>	<b>Considerações Numéricas . . . . .</b>	<b>56</b>
<b>4.7</b>	<b>Diagrama de fases . . . . .</b>	<b>58</b>
4.7.1	Estado Fundamental . . . . .	59
4.7.2	Temperatura Finita . . . . .	61
<b>5</b>	<b>FASES TOPOLÓGICAS . . . . .</b>	<b>64</b>
<b>5.1</b>	<b>Estudo Topológico da Fase Helicoidal . . . . .</b>	<b>64</b>
<b>5.2</b>	<b>Estudo Topológico da Fase de Skyrmions . . . . .</b>	<b>66</b>
<b>5.3</b>	<b>Diagramas Topológicos . . . . .</b>	<b>69</b>
<b>6</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS . . . . .</b>	<b>73</b>

REFERÊNCIAS . . . . .	74
-----------------------	----

# 1 INTRODUÇÃO

Quiralidade é um fenômeno que se manifesta em diversos ramos da ciência, assumindo um papel fundamental em áreas como a biologia [16, 17], química [18–20] e física [21, 22]. O seu nome é derivado do grego *kheir* para mão, que representa um objeto quiral presente em nosso cotidiano. Um objeto é dito quiral se ele é distinguível de sua reflexão especular, isto é, não existe nenhuma transformação que possa ser realizada sobre o sistema que o converta na imagem gerada por um espelho, desta forma, o objeto e a sua reflexão especular são imagens que não podem ser sobrepostas (figura 1a). Por outro lado, um objeto aquiral não pode ser diferenciado de sua imagem especular e não existe distinção na sobreposição das duas imagens (figura 1b). Ainda no contexto da física, observamos a presença deste fenômeno na matéria condensada através de sistemas magnéticos quirais [4, 5, 23–27].

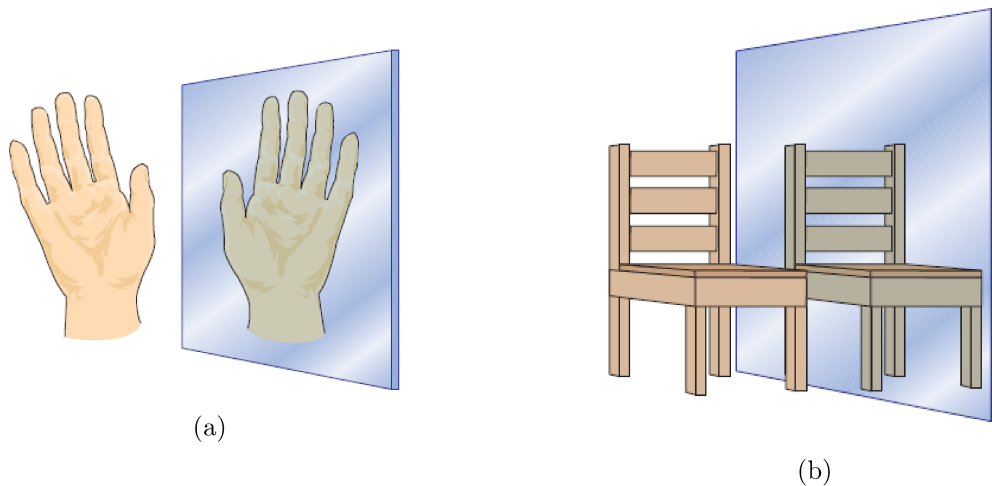


Figura 1 – A reflexão especular é uma transformação comum utilizada para testar a quiralidade dos objetos. Os objetos são **(a)** quirais quando suas imagens não podem ser sobrepostas e **(b)** não quirais quando suas imagens podem ser sobrepostas [1].

A importância da quiralidade em um sistema magnético pode ser evidenciada através de um simples exemplo. Consideramos duas paredes de domínio de Néel que rotacionam por  $\pi$  três domínios magnéticos em um modelo de spins contidos no  $\mathbf{R}^2$ , ilustrado pela figura 2. O vetor magnetização é rotacionado em um plano e pode ser descrito por uma variável angular  $\theta(x)$ . O índice topológico  $n$  [28, 29] pode ser calculado através da variação angular da magnetização. Enquanto  $x$  realiza um contorno sobre uma curva fechada  $C$ , calculamos o índice por  $n = \oint_C d\theta/2\pi$ . Na figura 2a, a magnetização rotaciona de 0 a  $\pi$  pela primeira parede de domínio e depois de  $\pi$  a  $2\pi$  na segunda, fechando um circuito completo e resultando em um índice topológico  $n = 1$ . Este resultado implica que a configuração magnética possui estabilidade topológica e não pode ser trivialmente destruída por um campo magnético externo, quando aplicado perpendicularmente ao sistema. Em contrapartida, a estrutura demonstrada na figura 2b não possui sentido

de rotação preferencial e rotaciona de 0 a  $\pi$  na primeira parede e de  $\pi$  a 0 na segunda, resultando em um índice topológico nulo. Este tipo de estrutura não possui estabilidade topológica e pode ser facilmente modificada por um campo magnético externo.

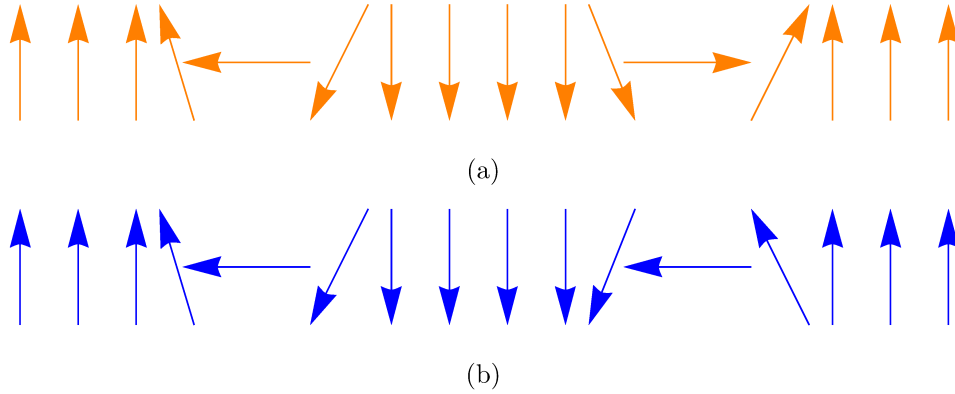


Figura 2 – Representação gráfica de uma estrutura de três domínios magnéticos, separados por duas paredes de domínio de Néel. **(a)** o vetor magnetização é rotacionado de 0 a  $\pi$  e depois  $2\pi$ . Neste tipo de estrutura o índice topológico do sistema é  $n = 1$ . Para o caso **(b)** em que o vetor magnetização é rotacionado de 0 a  $\pi$  e depois 0, o índice topológico é  $n = 0$ .

Tais estruturas magnéticas permitem a manifestação da quiralidade no sistema através da orientação de sua configuração de spins, que indicam um comportamento dextrogiro ou levogiro a partir de sua estrutura local. Isto se torna especialmente importante em estruturas moduladas como hélices ou vórtices magnéticos que podem ganhar estabilidade a partir da interação de Dzyaloshinskii-Moriya (*DM*), que surge devido a efeitos de spin-órbita em cristais que não possuem simetria de inversão [30,31]. Estas texturas

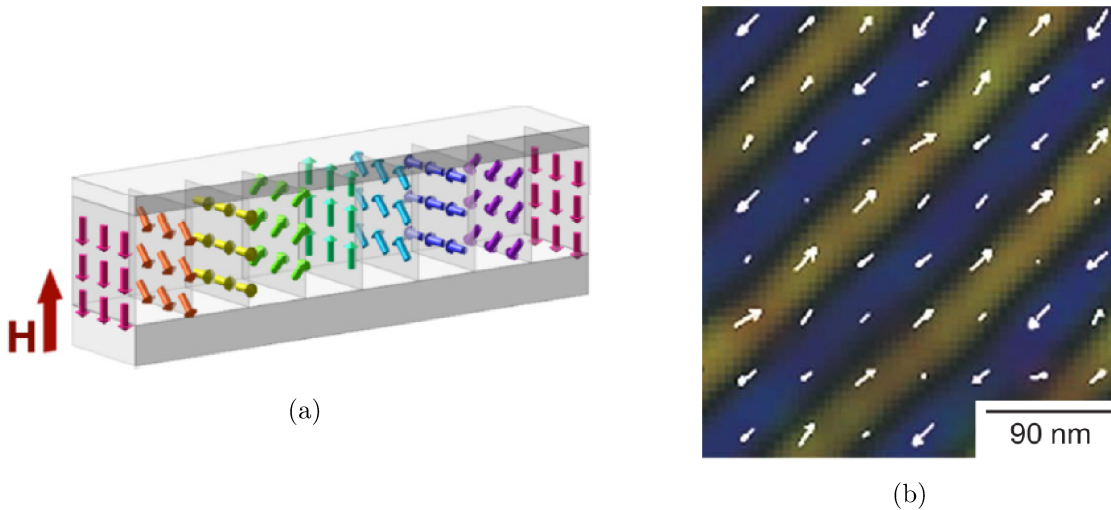


Figura 3 – Exemplo de uma textura magnética helicoidal **(a)** simulada em uma dimensão ressaltando o seu comportamento de hélice [2] e **(b)** observada experimentalmente no  $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$  através da microscopia de Lorentz [3].

helicoidais foram encontradas em filmes magnéticos finos de materiais centro-simétricos [32].

Bogdanov *et al* [33,34] indicaram no início dos anos noventa que a interação de *DM* poderia estabilizar não apenas estruturas unidimensionais, mas também texturas magnéticas em duas e três dimensões que não possuem estabilidade natural, e em geral, tendem a colapsar em configurações homogêneas no sistema. Estas soluções foram introduzidas inicialmente como vórtices magnéticos, devido a semelhança estrutural com a rede de vórtices de Abrikosov [35], geralmente organizada de modo triangular. O termo *skyrmion* foi originalmente idealizado no contexto da física de partículas e inicialmente estava relacionado a soluções locais propostas por Skyrme [36] em seu modelo para a dinâmica de píons interagentes. Ao longo dos anos, o termo foi se disseminando e hoje em dia é usado para indicar estruturas locais suaves que possuem tanto estabilidade física, quanto estabilidade topológica.

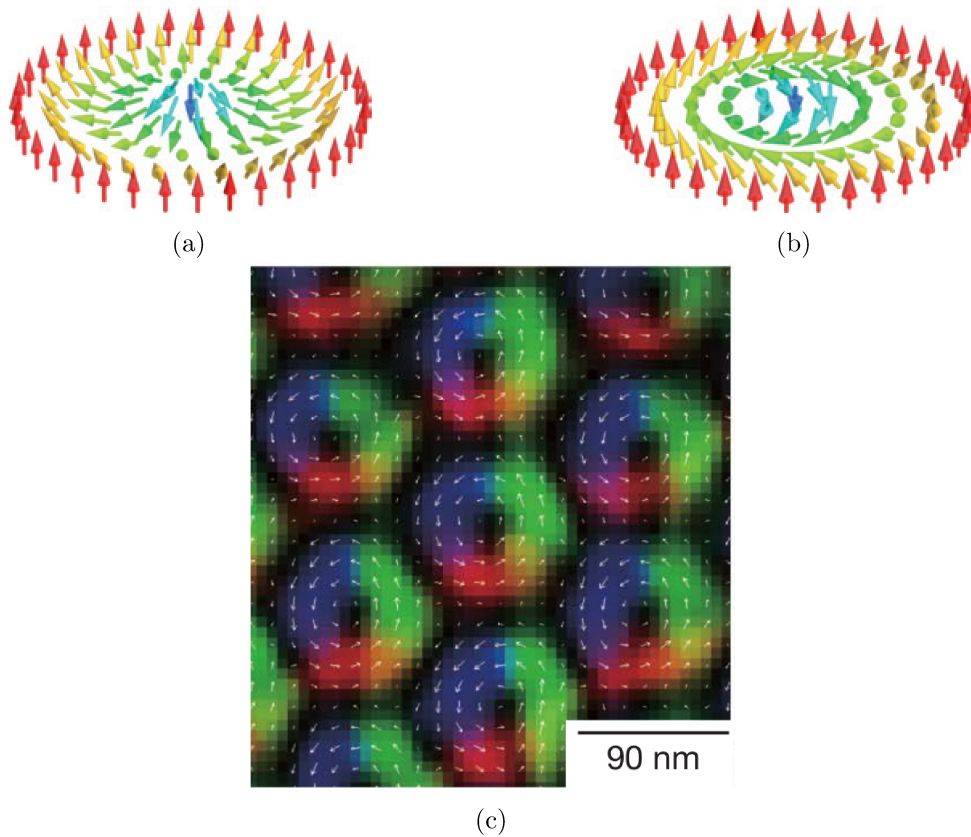


Figura 4 – **(a-b)** Textura magnética de um *skyrmion* em um ferromagneto em duas dimensões com anisotropia magnética uniaxial ao longo de um eixo vertical ao plano. O vetor magnetização perpendicular ao plano possui sentido positivo nas bordas, enquanto que no centro possui sentido negativo. Movendo-se ao longo de um diâmetro **(a)** a magnetização rotaciona de  $2\pi$  sobre um eixo perpendicular ao diâmetro **(b)** e por  $2\pi$  em torno do diâmetro o que corresponde a diferentes orientações do vetor de Dzyaloshinskii-Moriya [4]. **(c)** Microscopia de imagem de Lorentz (*Lorentz TEM*) de uma rede de *skyrmions* no  $Fe_{1-x}Co_xSi$  [3].

A textura magnética de *skyrmions* contém um vetor magnetização perpendicular ao plano na borda, enquanto sua estrutura interna realiza uma rotação sobre o vetor magnetização até atingir o sentido oposto de orientação das bordas no centro [34,37], a sua

estrutura característica pode ser observada na figura 4. A existência deste tipo de textura em materiais magnéticos surge da competição entre a interação de Dzyaloshinskii-Moriya, a interação de troca magnética e pode ser estabilizada através de anisotropias [34,38] na rede. A formação desta estrutura na matéria condensada já foi observada em materiais como o  $MnSi$  em três dimensões [23,39], bem como em filmes finos [3,4,26] onde a estabilidade da configuração se apresenta de forma mais expressiva.

O diagrama de fases de sistemas magnéticos com a interação de Dzyaloshinskii-Moriya já foi estudado experimentalmente em três dimensões [23,27] e em duas dimensões [3,5]. A figura 5 mostra o comportamento típico de um material magnético quiral ( $Cu_2OSeO_3$ ), onde a presença da interação de Dzyaloshinskii-Moriya foi relatada [5]. O estudo em duas dimensões é realizado através da microscopia de imagem de Lorentz com um campo magnético  $H \parallel [111]$  aplicado a amostra.

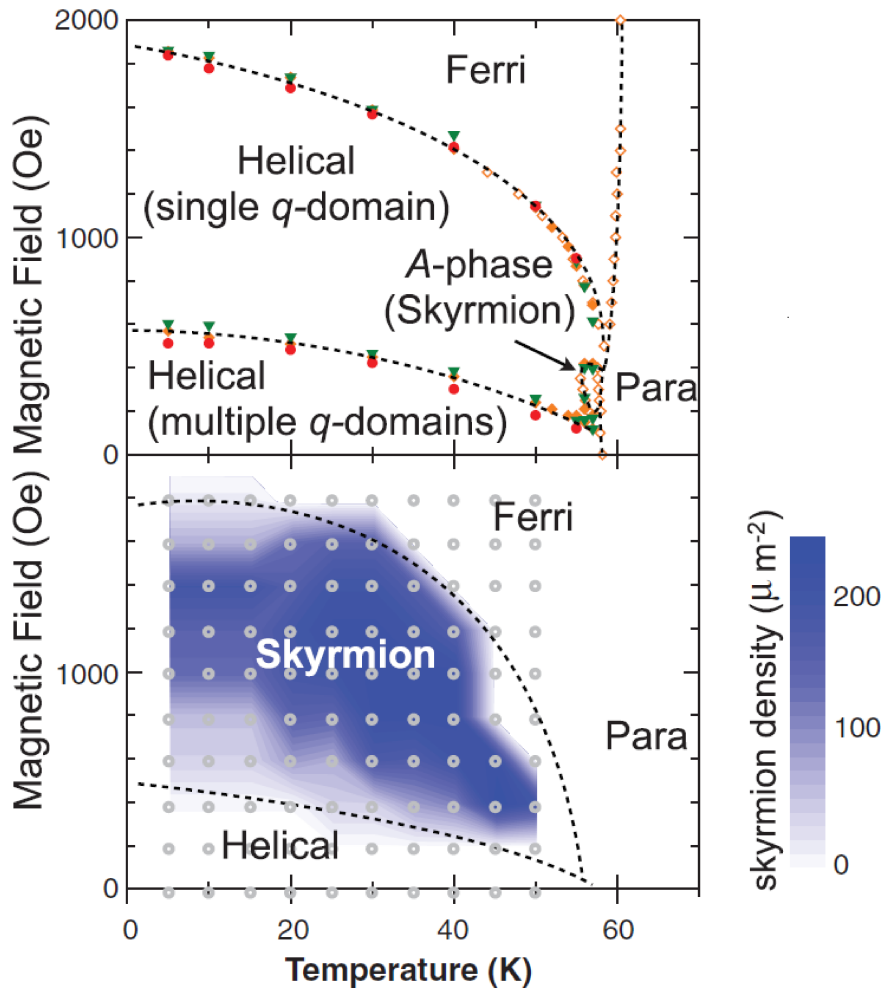


Figura 5 – Diagrama de fases experimental de um sistema magnético quiral ( $Cu_2OSeO_3$ ) em que a existência da interação de Dzyaloshinskii-Moriya foi comprovada [5]. A amostra foi estudada em três dimensões (diagrama superior) e duas dimensões (diagrama inferior).

Para sistemas em três dimensões, a textura de *skyrmions* está limitada a uma pequena região do diagrama [40,41], em que a formação de uma rede triangular foi

identificada [23,42]. Por outro lado, a textura de *skyrmions* parece ser estabilizada em uma região muito maior do diagrama em sistemas bidimensionais, como pode ser observado no trabalho de Kanazawa *et al* [3] onde a espessura de uma amostra foi considerada para a análise da estabilidade da fase de *skyrmions*. Este é um dos motivos pelo qual o estudo de filmes magnéticos finos que contém a interação de Dzyaloshinskii-Moriya se torna interessante no meio acadêmico e tecnológico. A quiralidade em sistemas magnéticos nanométricos promete desempenhar um papel fundamental na construção de dispositivos spintrônicos, onde utilizamos propriedades da carga e spin do elétron para a transmissão e manipulação de dados. A característica de localidade e estabilidade dos *skyrmions* os tornam objetos fascinantes para aplicações na spintrônica [4] e relevantes no estudo do efeito Hall topológico [43–47]. Ainda na literatura, já foi proposto o uso desta textura magnética para dispositivos capazes de armazenar *bits* de memória [48,49], devido a sua estrutura magnética de orientação perpendicular nas bordas e rotação interna.

Apesar da extensa literatura acerca destes sistemas, pouco progresso foi realizado em direção à caracterização topológica destas texturas magnéticas. Recentemente, Huang *et al* [6] produziram um trabalho de caráter experimental em uma amostra de  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  onde a presença da interação de Dzyaloshinskii-Moriya foi identificada [50] e a formação de uma rede triangular de *skyrmions* foi confirmada [6], o diagrama de fases característico da amostra pode ser observado na figura 6a.

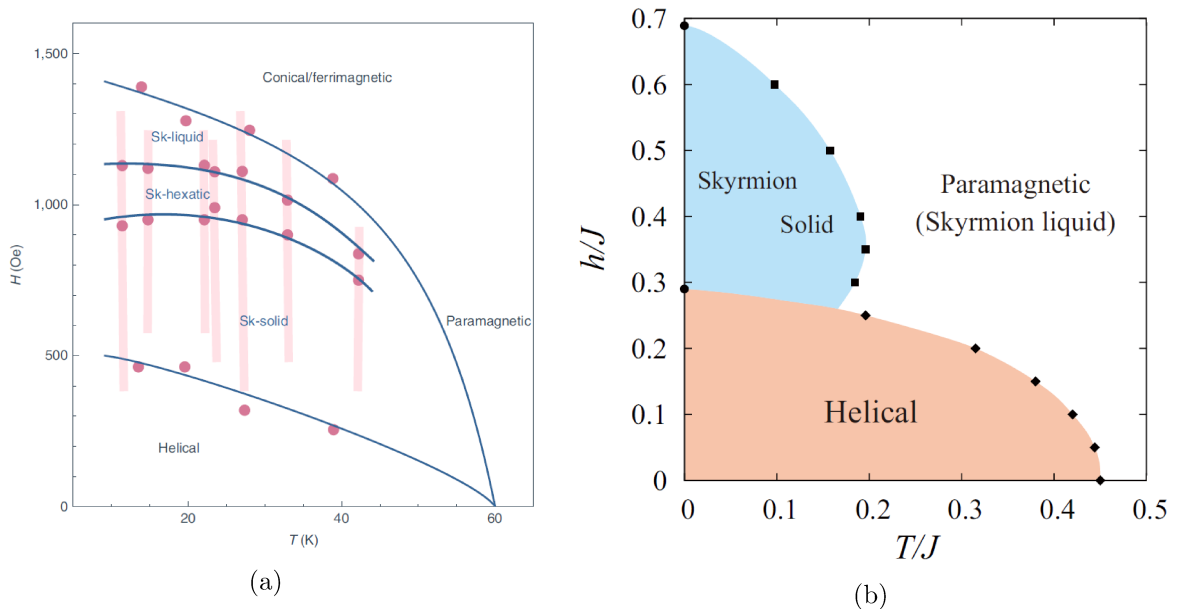


Figura 6 – Diagrama de fases topológico de um sistema magnético em duas dimensões a partir de resultados (a) experimentais de uma amostra de  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  [6] e (b) simulados em um modelo clássico de spins de Heisenberg com interação de  $DM$  [7].

Outro trabalho relevante para o estudo das propriedades topológicas destes sistemas foi publicado recentemente devido a Nishikawa *et al* [7], no qual um estudo foi realizado em um modelo clássico de spins de Heisenberg com a presença da interação de  $DM$  através de

simulações de Monte Carlo. O diagrama de fases topológico do modelo está representado na figura 6b. No estado fundamental, é confirmada a presença de um cristal de *skyrmions* em uma rede triangular, minimizando a energia da rede em comparação a uma rede quadrada [7]. Outro resultado interessante surge da ausência da fase intermediária hexática no derretimento do sistema, como esperaríamos que acontecesse em uma textura magnética do tipo bolha a partir de considerações da teoria *KTHNY* (Kosterlitz-Thoules-Halperin-Nelson-Young) [51–53]. Segundo os autores, este fato pode ser atribuído a presença de uma interação de  $DM$  muito intensa ( $D/J = 1$ ), o que não é observado em amostras experimentais [54, 55].

Este trabalho tem como objetivo caracterizar e estudar as propriedades do diagrama de fases de um sistema em duas dimensões que contém a interação de troca magnética,  $DM$  e uma anisotropia *easy-plane* ou *easy-axis*, caracterizando as fases não apenas pelas suas propriedades locais, mas também pelas suas propriedades em grandes escalas de comprimento. Para estudar qualitativamente a natureza deste modelo, faremos uso do método de campo médio variacional, que nos permitirá construir um funcional energia e analisar as texturas magnéticas presentes no sistema. Para completar o estudo do modelo, utilizaremos a teoria *KTHNY* com o objetivo de estudar as transições de fase topológicas, mediadas pela proliferação de defeitos topológicos no sistema. A textura helicoidal é caracterizada topologicamente pela distinção entre uma configuração sólida e um líquido isotrópico, enquanto a textura magnética de *skyrmions* passa por uma transição em duas etapas com o surgimento da fase intermediária hexática em seu derretimento térmico (*melting*).

Seguindo o propósito deste trabalho, o capítulo 2 tem como objetivo colocar em evidência resultados bem estabelecidos da literatura a luz do nosso modelo. Começamos o capítulo analisando detalhadamente as interações que competem entre si para o surgimento de texturas magnéticas não triviais, como o padrão helicoidal de magnetização e o de *skyrmions*. Em seguida, faremos uso do método de campo médio variacional para construir o funcional energia livre do modelo, que será usado na determinação do diagrama de fases. Por fim, dissertaremos sobre o derretimento de um sistema de faixas magnéticas, bem como uma discussão acerca do derretimento de redes cristalinas triangulares e a sua similaridade com um sistema de bolhas magnéticas.

O capítulo 3 adapta inicialmente o funcional discreto obtido no capítulo anterior em uma versão contínua. Depois, determinamos uma escala de energia e temperatura com o objetivo de adimensionalizar o sistema, este procedimento é realizado para identificar e descrever o modelo a partir do menor número de parâmetros livres. A adimensionalização do sistema também é fundamental para um tratamento numérico posterior.

Em seguida, discutimos e analisamos as diferentes texturas magnéticas em nosso funcional energia livre, construindo as soluções moduladas da magnetização e minimizando-as para o nosso funcional no capítulo 4. Por fim, esboçamos o diagrama de fases de campo



magnético e anisotropia, bem como diagramas de campo magnético e temperatura, de modo a sistematizar e estudar as propriedades e características singulares dos mesmos.

Finalmente, com base nos diagramas obtidos, estudamos no capítulo 5 os diagramas topológicos em nosso modelo, utilizando como ponto de partida a teoria *KTHNY* para o derretimento de cristais em duas dimensões. Em um sistema bidimensional, a fase sólida possui ordem posicional de quase longo alcance e ordem orientacional de longo alcance. No processo de derretimento, a proliferação de defeitos topológicos destrói a ordem posicional mas mantém a ordem orientacional, caracterizando a fase intermediária hexática. Os mesmos defeitos são responsáveis pela destruição da ordem orientacional em altas temperaturas, onde identificamos uma fase líquida. A sequência de quebras de simetria evidenciada no sistema através do uso da teoria *KTHNY* nos permitirá identificar as regiões topológicas referentes à textura magnética de *skyrmions*. Para a textura helicoidal, a inclusão de defeitos topológicos nos permite comparar o seu hamiltoniano efetivo ao do modelo *XY*. Como consequência do seu derretimento, a proliferação de defeitos no sistema destrói a ordem orientacional, em uma transição sólida-líquida.

## 2 TEORIA GERAL

### 2.1 INTERAÇÕES COMPETITIVAS

Pelas experiências em nosso cotidiano, notamos que alguns materiais apresentam estruturas ordenadas a nível macroscópico. A partir de uma perspectiva microscópica, tais estruturas manifestam um caráter periódico, sendo um cristal ideal construído a partir de infinitas repetições de uma estrutura de ordem unitária no espaço. A periodicidade apresenta no mínimo duas escalas de comprimento relevantes [11], que atribuímos ao espaçamento e ordenamento dos átomos dentro de um domínio, e ao de um domínio em si. Associamos a esta organização um parâmetro de ordem, que determina uma modulação periódica, e identifica o que chamamos de estrutura modulada.

Como exemplo simples de uma estrutura modulada, podemos observar o comportamento de filmes epitaxiais. Estas estruturas são construídas através da deposição de um material sobre um substrato (cristal). Este procedimento pode levar o material a cobrir todo o substrato, criando uma camada suave acima de sua superfície, ou então favorecer o surgimento de domínios, também conhecidos como ilhas. A sua formação está atrelada a propriedades do substrato, ao tipo de material depositado e também a fatores externos como a temperatura. Como consequência, a formação dos domínios nestes filmes implica em estruturas ordenadas ao longo do material, como pode ser observado na figura 7, em três substratos distintos. Estas estruturas moduladas estão presentes em diversos sistemas [56–59] e são especialmente interessantes em sistemas magnéticos [60, 61].

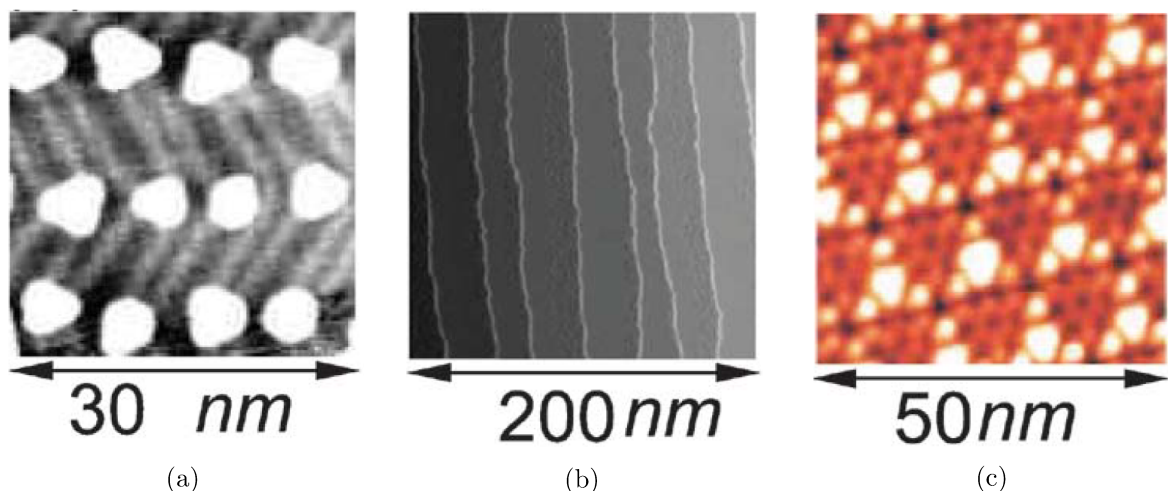


Figura 7 – Estruturas moduladas geradas com o microscópio de corrente de tunelamento (*STM*) a partir da deposição (a) de *Co* em *Au*(111) [8], (b) de *Fe* em *W*(110) [9] e (c) de *In* em *Si*(111) [10]. Imagens editadas e retiradas da referência [11].

Materiais ferromagnéticos possuem propriedades únicas não somente por seus átomos manifestarem momentos magnéticos e elétricos de forma intensa, mas também pela sua capacidade de se organizar em regiões, conhecidas como domínios magnéticos.

Em cada domínio, os momentos magnéticos estão alinhados em direções preferenciais no sistema. Apesar disto, o material pode não manifestar nenhuma característica magnética macroscópica, que atribuímos a orientações distintas entre domínios, resultando em uma magnetização líquida nula. Por outro lado, um campo magnético externo pode alinhar estes domínios e manifestar um comportamento magnético. A formação de padrões em um domínio magnético pode ser observada em uma variedade de sistemas físicos através de estruturas e texturas não triviais [61–65].

O comportamento periódico destas estruturas moduladas é atribuído à competição entre as interações presentes, favorecendo a não homogeneidade das texturas magnéticas, onde originalmente um comportamento uniforme seria esperado [66]. Entendemos que o período das modulações é dado pela intensidade relativa entre as interações competitivas do sistema, que podem ser ajustadas pela temperatura, ou a partir da variação de agentes externos, como o campo magnético e o campo elétrico. Em sistemas magnéticos bidimensionais, podemos encontrar uma certa regularidade na manifestação de texturas do tipo faixas (*stripes*) e configurações de predominância circular, que denominamos bolhas (*bubbles*), que surgem devido à competição entre interações de curto e longo alcance no sistema. Exemplos destas texturas podem ser observadas na figura 8.



Figura 8 – Texturas magnéticas de **(a)** faixas e **(b)** bolhas em um filme fino de  $Gd_3Ga_5O_{12}$  [12].

O exemplo mais familiar da competição entre interações de curto e longo alcance surge do estudo de sistemas dipolares [66–68]. Este tipo de sistema considera a competição entre a interação de troca magnética (curto alcance) e a interação dipolar (longo alcance). A interação de troca é o termo dominante sobre o dipolar no hamiltoniano e prefere um alinhamento paralelo (ferromagneto) ou anti paralelo (antiferromagneto) entre vizinhos na rede como mostra a figura 9. Entretanto, devido ao curto alcance da interação de troca magnética, a interação dipolar compete no sistema quando existe um número grande o suficiente de dipolos.

A configuração homogênea representada na figura 9a possui um custo alto de energia para o termo dipolar por possuir superfícies completamente descompensadas. Os polos formados nas superfícies podem ser evitados, e portanto, a energia dipolar é

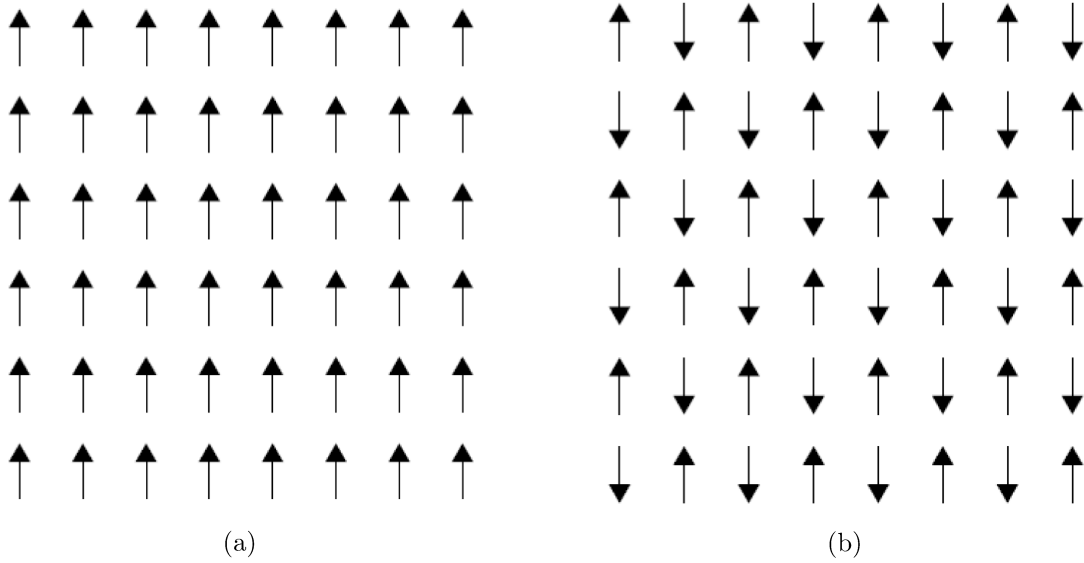


Figura 9 – Ordenamento dos momentos magnéticos de um sistema **(a)** ferromagnético e **(b)** antiferromagnético.

consideravelmente reduzida dividindo o sistema em subdomínios magnéticos homogêneos. Tal configuração no entanto, é custosa energeticamente para a interação de troca, já que perto da fronteira entre dois domínios os momentos magnéticos vizinhos manifestarão entre si, um ângulo mútuo indesejado. Porém, devido ao caráter de curto alcance da interação de troca, a região onde a não colinearidade prevalece é pequena. Deste modo, se o tamanho de um domínio não for muito pequeno comparado a sua fronteira, a sua formação é favorecida, onde o aumento da energia de troca nas fronteiras é compensada pela minimização da energia dipolar. Esta competição dá origem a estruturas e modulações não triviais similares as observadas na figura 8.

De maneira similar ao modelo dipolar discutido acima, a competição entre a interação de troca magnética e a interação de Dzyaloshinskii-Moriya favorece o surgimento de estruturas magnéticas não triviais no sistema [33, 34]. Em sistemas bidimensionais, observamos a formação de estruturas helicoidais ao longo de uma extensa região do diagrama de fases [3, 4, 26, 69]. Esta textura apresenta uma rotação de seus spins ao longo de um eixo preferencial (figura 3a) e se assemelha a uma configuração de faixas (figura 3b) que discutimos anteriormente para o modelo dipolar. Por outro lado, a configuração de *skyrmions* que também surge desta competição organiza os seus spins em objetos que se assemelham a vórtices magnéticos (figura 4). Uma das principais características desta textura se deve a sua estabilidade topológica, pelo qual a configuração não pode ser deformada continuamente em estados ferromagnéticos no sistema. Esta característica tem chamado a atenção da academia para aplicações na área de spintrônica [4].

Dada a devida importância a estruturas moduladas na física, especialmente na matéria condensada moderna, estudaremos a seguir as interações presentes em nosso modelo, pois estamos interessados em analisar os mecanismos de competição entre as

mesmas. Consideramos assim, a interação de  $DM$ , a interação de troca e uma anisotropia *easy-axis* ou *easy-plane* em nosso modelo.

### 2.1.1 Interação de Troca

A interação de troca é oriunda da anti-simetrização da função de onda devido ao princípio de exclusão de Pauli. Esta interação aparece sempre que existe uma superposição da função de onda de elétrons vizinhos na rede. Como esta superposição diminui rapidamente com o aumento da distância, dizemos que a interação de troca é uma interação de curto alcance. Deste modo, o custo energético devido a uma dada configuração de spins é frequentemente modelado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.1)$$

onde a soma é realizada sobre primeiros vizinhos  $i$  e  $j$  na rede.  $\mathbf{S}_i$  representa uma grandeza adimensional no sistema que é proporcional ao spin da rede em seu sítio  $i$ , enquanto  $J$  é a constante de energia de troca entre spins vizinhos na rede.

Para o caso em que temos um acoplamento ferromagnético, a constante de troca assume um valor positivo  $J > 0$ , o que favorece ao sistema um ordenamento paralelo de seus spins. É importante notar que neste contexto assumimos que a constante de energia de troca é independente da direção espacial de alinhamento dos spins. Consideramos em nosso modelo o spin de Heisenberg, que representa um objeto com liberdade de rotação em  $\mathbf{R}^3$ . Desta forma, para nosso sistema bidimensional, escrevemos o termo do hamiltoniano relacionado a interação de troca

$$\mathcal{H}_{ex} = J \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{y}}), \quad (2.2)$$

sendo  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  os vetores unitários que formam a base do plano  $xy$ , enquanto  $\mathbf{S}_{\mathbf{r}}$  é o spin localizado na posição  $\mathbf{r}$  da rede.

### 2.1.2 Anisotropia

Em um material magnético isotrópico ideal, não existe direção preferencial para o alinhamento dos momentos magnéticos do sistema. Por outro lado, efeitos anisotrópicos neste contexto estabelecem como propriedades e respostas magnéticas diferem em direções distintas no sistema. A energia de uma amostra com alguma ordem magnética pode depender da direção relativa de magnetização em relação a algum eixo; no caso mais simples, a estrutura possui um eixo preferencial para o qual a energia é minimizada. Em alguns sistemas, podemos modelar a energia de orientação devido à anisotropia como uma função do ângulo  $\theta$  entre a magnetização e um determinado eixo estabelecido. A energia

de orientação por volume assume então a forma

$$\frac{E_a}{V} = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta, \quad (2.3)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre a magnetização e o eixo. Dependendo da magnitude das constantes  $K_1$  e  $K_2$ , a anisotropia do sistema pode assumir um caráter *easy-axis*, quando  $|K_1| \gg |K_2|$  para  $K_1 > 0$  onde temos um eixo preferencial de mínima energia, ou *easy-plane* quando  $|K_1| \gg |K_2|$  e  $K_1 < 0$ , no qual o mínimo da energia está contido em um plano. As constantes possuem dimensão de  $[Energia/Volume]$ . Em um filme fino, podemos expressar sua energia usando uma constante anisotrópica efetiva

$$E_a = K_{ef} \cos^2 \theta, \quad (2.4)$$

onde  $\theta$  representa agora o ângulo entre a magnetização e um eixo perpendicular à superfície do plano. A origem da anisotropia no material pode estar relacionada a sua estrutura cristalina, ao formato da amostra ou então a algum estresse induzido no sistema.

A anisotropia que surge devido à estrutura cristalina é uma propriedade intrínseca do material. A magnetização assume diferentes valores quando um campo externo é aplicado em diferentes direções da estrutura cristalina. A sua origem se deve ao acoplamento spin-órbita e a interação do campo externo com o cristal. A origem da anisotropia relacionada a forma da amostra se deve ao campo desmagnetizante. Como isto depende explicitamente do formato do sistema, não é considerada uma propriedade intrínseca. Por fim, a anisotropia induzida surge quando criamos uma direção preferencial de magnetização a partir de um estresse provocado no sistema.

Em nosso modelo, descrevemos a anisotropia a partir do hamiltoniano

$$\mathcal{H}_a = b \sum_r (\hat{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{S}_r)^2, \quad (2.5)$$

com  $\mathbf{S}_r$  representando o spin localizado em um sítio da rede, enquanto  $\hat{\mathbf{z}}$  é o vetor diretor do eixo perpendicular ao plano  $xy$ . A constante anisotrópica é  $b$  e favorece um alinhamento *easy-axis* para  $b < 0$  e *easy-plane* para  $b > 0$ .

### 2.1.3 Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

A descoberta da interação de Dzyaloshinskii-Moriya, também conhecida como interação anti-simétrica, está atrelada à observação de pequenos efeitos ferromagnéticos em materiais tipicamente anti-ferromagnéticos. Em 1958, através da análise de materiais como o  $\alpha - Fe_2O_3$ ,  $MnCO_3$  e  $CoCO_3$ , Igor Dzyaloshinskii [30] baseou-se em argumentos de simetria da teoria de Landau sobre transições de fase de segunda ordem [70], e indicou que a interação se manifestava devido a efeitos relativísticos entre o spin e a rede do sistema. Dois anos após esta publicação, Toru Moriya [31] estendeu a teoria de supertroca de Anderson [71] e identificou o acoplamento spin-órbita como o mecanismo microscópico

que dava origem a interação anti-simétrica no mesmo grupo de materiais. Moriya mostrou também que dependendo do tipo de estrutura cristalina, tanto a interação anti-simétrica, quanto uma anisotropia magneto cristalina podiam ser responsáveis pela tendência de inclinação entre os momentos magnéticos do material [31].

Em essência, a interação de Dzyaloshinskii-Moriya é um termo que contribui para a interação de troca magnética total entre dois spins vizinhos da rede. A sua contribuição para o hamiltoniano do sistema é dada por

$$\mathcal{H}_{DM} = \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j), \quad (2.6)$$

onde  $\mathbf{S}_i$  representa a partícula-spin localizada no sítio  $i$  da rede, enquanto  $\mathbf{D}_{ij}$  simboliza o vetor de Dzyaloshinskii-Moriya gerado pela interação de troca anti-simétrica entre os spins localizados nos sítios  $i$  e  $j$  da rede. Para definir as possíveis direções do vetor  $\mathbf{D}_{ij}$ , utilizamos como referência a figura 10.

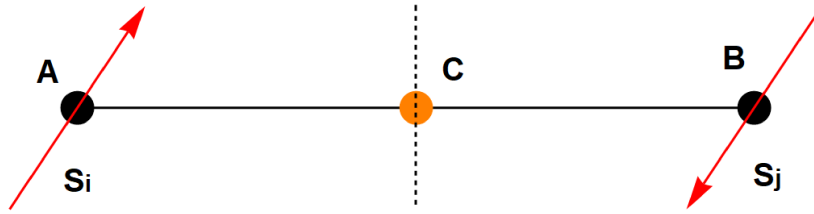


Figura 10 – A definição do vetor de Dzyaloshinskii-Moriya depende de considerações de simetria entre spins vizinhos  $\mathbf{S}_i$  e  $\mathbf{S}_j$  representados pelos pontos A e B. O ponto C é bissetor à linha AB.

A partir das considerações de Moriya [31]: **1.** Se existe um centro de inversão localizado no ponto C, o vetor  $\mathbf{D}_{ij}$  é nulo; **2.** Se um plano espelho perpendicular a linha AB passa pelo ponto C,  $\mathbf{D}_{ij} \perp AB$ ; **3.** Se existe um plano espelho que contém A e B,  $\mathbf{D}_{ij}$  é perpendicular ao plano espelho; **4.** Se um eixo de rotação 2-fold perpendicular a AB passa pelo ponto C,  $\mathbf{D}_{ij}$  é perpendicular ao eixo de rotação; **5.** Se existe um eixo de rotação n-fold ( $n \geq 2$ ) ao longo de AB,  $\mathbf{D}_{ij} \parallel AB$ .

Outro resultado exposto por Dzyaloshinskii, concluía que a interação anti-simétrica estabilizava estruturas moduladas com período de longo alcance em sistemas magnéticos que não são centrossimétricos, onde o vetor magnetização possuía a tendência de assumir uma textura magnética não trivial [72]. Anos depois, Bak e Jensen [73] e mais tarde Kataoka e Nakanishi [74] provaram que tais texturas são causadas de fato pela interação de Dzyaloshinskii-Moriya.

Como a interação favorece o inclinamento entre spins vizinhos em um sistema magnético, ela acaba se tornando uma fonte de pequenos efeitos ferromagnéticos em materiais usualmente anti-ferromagnéticos [30, 31]. A existência desta interação no sistema está diretamente ligada a estabilidade da fase de *skyrmions*, como será discutido com mais detalhes no capítulo 4. Para a inclusão deste termo em nosso sistema bidimensional,

escolhemos orientar o vetor de Dzyaloshinskii-Moriya de maneira perpendicular ao plano da rede, resultando em

$$\mathcal{H}_{DM} = -D \sum_r \left[ (\mathbf{S}_r \times \mathbf{S}_{r+\hat{x}}) \cdot \hat{x} + (\mathbf{S}_r \times \mathbf{S}_{r+\hat{y}}) \cdot \hat{y} \right], \quad (2.7)$$

onde  $D$  é o peso da interação de Dzyaloshinskii-Moriya e  $\mathbf{S}_r$  o spin na rede.

O próximo passo consiste em analisar estas interações sobre a ótica da teoria do campo médio variacional. Isto nos permitirá estudar as estruturas moduladas presentes no modelo posteriormente neste trabalho.

## 2.2 CAMPO MÉDIO VARIACIONAL

Dedicamos esta seção do capítulo para uma breve discussão sobre o método de campo médio variacional, bem como sua aplicação em nosso modelo com o objetivo de obter um funcional energia livre, que será explorado no capítulo 4 para a construção do diagrama de fases de campo magnético por temperatura e campo magnético por anisotropia. Vamos obter a princípio uma versão discreta do funcional, que será transformado em uma versão contínua e propriamente adimensionalizado no capítulo 3 para um tratamento numérico posterior.

Existem diversas maneiras de aplicar a técnica de campo médio no estudo de um dado sistema, porém, a ideia fundamental consiste em construir um modelo simplificado a partir do original, onde substituímos o tratamento individual da interação entre seus componentes, pela ação de um campo efetivo sobre uma componente individual do modelo. A primeira versão conhecida deste tipo de técnica foi empregada no estudo de transições de fase, devido a Pierre Currie e Pierre Weiss. Apesar do campo médio ignorar flutuações no sistema e prever incorretamente os expoentes críticos abaixo da dimensão crítica superior, os seus resultados são válidos para a análise qualitativa que buscamos neste trabalho. Na aproximação de campo médio variacional, estamos interessados em construir um funcional energia livre  $\mathcal{F}$ , que ao ser minimizado em relação aos parâmetros variacionais representa uma aproximação da energia livre do sistema. Isto significa que a energia pode se tornar tão confiável quanto melhor for nossa aproximação variacional. Para começar a construção de nosso funcional, devemos falar primeiramente da desigualdade de Bogoliobov, base da aproximação de campo médio [75, 76].

Encontrar a energia livre de Helmholtz é uma tarefa desafiadora, especialmente quando tratamos de sistemas interagentes. Considerar a interação entre os constituintes do modelo impõe uma dificuldade natural no cálculo de suas propriedades termodinâmicas. Desta forma, a aproximação variacional de campo médio se torna uma ferramenta poderosa no auxílio da descrição destes sistemas. Considere um hamiltoniano arbitrário  $\mathcal{H}$  que pode ser decomposto em  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ , onde  $\mathcal{H}_0$  representa um modelo que pode ser resolvido



exatamente. Para ilustrar o caráter perturbativo desta construção, escrevemos ainda

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1, \quad (2.8)$$

sendo  $\lambda$  um parâmetro adequadamente limitado em  $0 \leq \lambda \leq 1$ , que nos permite passar de um modelo exatamente solúvel em  $\lambda = 0$ , ao nosso hamiltoniano de interesse em  $\lambda = 1$ . O potencial termodinâmico de energia livre  $F$  que corresponde a este hamiltoniano  $\mathcal{H}$  é descrito por

$$-\beta F(\lambda) = \ln (\text{Tr}\{e^{\beta \mathcal{H}(\lambda)}\}), \quad (2.9)$$

onde  $\beta = (k_B T)^{-1}$  e  $k_B = 1.38064 \times 10^{-23} m^2 k g s^{-2} K^{-1}$  é a constante de Boltzmann. Tomando a segunda derivada da energia livre em relação ao parâmetro  $\lambda$  encontramos

$$\frac{d^2 F(\lambda)}{d\lambda^2} = -\beta \left( \langle \mathcal{H}_1^2 \rangle - \langle \mathcal{H}_1 \rangle^2 \right), \quad (2.10)$$

pelo qual o processo de médias é realizado sobre o peso canônico  $e^{\beta \mathcal{H}(\lambda)}$  e definimos a média de  $\mathcal{H}_1$  partir da primeira derivada da energia livre

$$\langle \mathcal{H}_1 \rangle = \frac{dF(\lambda)}{d\lambda}. \quad (2.11)$$

Uma consequência imediata da expressão (2.10) sugere que a segunda derivada da energia livre é negativa ou então nula, para qualquer valor do parâmetro  $\lambda$ . Isto implica que a energia livre como função do parâmetro  $\lambda$  é côncava. Deste modo, a curva de energia está sempre abaixo da curva tangente traçada por  $(dF/d\lambda)_{\lambda=0}$  definindo um limite superior na energia, que no caso de interesse do hamiltoniano original  $\mathcal{H}$  em que  $\lambda = 1$ , encontramos

$$F \leq F_0 + \langle \mathcal{H}_1 \rangle_0, \quad (2.12)$$

em que a média de  $\mathcal{H}_1$  é realizada sobre o hamiltoniano não perturbado  $\mathcal{H}_0$ , a expressão (2.12) é conhecida como a desigualdade de Bogoliubov. A desigualdade nos informa que a energia livre de Helmholtz de um sistema descrito por um hamiltoniano  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$  é menor, ou no melhor dos casos igual a energia livre do sistema não perturbado  $F_0$  mais a média do hamiltoniano perturbado  $\mathcal{H}_1$ , realizada sobre o sistema não perturbado  $\mathcal{H}_0$ . Podemos reescrever ainda a desigualdade em (2.12) a partir do hamiltoniano de interesse  $\mathcal{H}$ ,

$$F \leq \langle \mathcal{H} \rangle_0 - T S_0, \quad (2.13)$$

que se torna o nosso ponto de partida para a construção do funcional energia livre. Dada a discussão da seção anterior, definimos neste momento o hamiltoniano do nosso modelo, que contém a interação de troca ferromagnética, a interação de Dzyaloshinskii-Moriya,

uma anisotropia magnética e um acoplamento com um campo magnético externo descrito por

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_r \mathbf{S}_r \cdot (\mathbf{S}_{r+\hat{x}} + \mathbf{S}_{r+\hat{y}}) - \mathbf{h} \cdot \sum_r \mathbf{S}_r + b \sum_r (\hat{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{S}_r)^2 \\ & - D \sum_r \left[ (\mathbf{S}_r \times \mathbf{S}_{r+\hat{x}}) \cdot \hat{\mathbf{x}} + (\mathbf{S}_r \times \mathbf{S}_{r+\hat{y}}) \cdot \hat{\mathbf{y}} \right]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Para que seja possível obter as médias descritas em (2.13), definimos ainda

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_r \mathbf{h}_{ef} \cdot \mathbf{S}_r, \quad (2.15)$$

sendo  $\mathbf{h}_{ef}$  um parâmetro variacional externo, que assume a forma de um campo efetivo atuando sobre um spin  $\mathbf{S}_r$  na rede. Este parâmetro externo será eventualmente reescrito através da magnetização local do sistema, que é um parâmetro de ordem comum na análise de sistemas magnéticos. Calculamos portanto, a média sobre nosso hamiltoniano da seguinte maneira

$$\langle \mathcal{H} \rangle_0 = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} \hat{\mathcal{H}} \right\}_0, \quad (2.16)$$

onde  $\hat{\rho}$  representa a matriz densidade que descreve o estado estatístico de um sistema. Como esta aproximação desacopla a interação entre os sítios, escrevemos a matriz densidade total

$$\hat{\rho} = \prod_r \hat{\rho}_0(r), \quad (2.17)$$

a partir dos sítios individuais da rede que contém um spin e calculamos a média do hamiltoniano termo a termo. Ao calcular a média, teremos combinações do tipo  $\text{Tr} \{ \hat{\rho}_0(r) \mathbf{S}_r \} = \mathbf{m}(r)$  definindo a média da magnetização local do sistema. Desta forma, obtemos o hamiltoniano nesta aproximação de campo médio

$$\begin{aligned} \mathcal{H}[\mathbf{m}(r)] = & -J \sum_r \mathbf{m}(r) \cdot \left( \mathbf{m}(r + \hat{x}) + \mathbf{m}(r + \hat{y}) \right) - \mathbf{h} \cdot \sum_r \mathbf{m}(r) + b \sum_r (\hat{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{m}(r))^2 \\ & - D \sum_r \left[ (\mathbf{m}(r) \times \mathbf{m}(r + \hat{x})) \cdot \hat{\mathbf{x}} + (\mathbf{m}(r) \times \mathbf{m}(r + \hat{y})) \cdot \hat{\mathbf{y}} \right] \end{aligned} \quad (2.18)$$

descrito agora através de um funcional da média local de magnetização do sistema. Para completar nossa análise de campo médio, devemos determinar a entropia também como um funcional da magnetização local. Partimos portanto, da definição de entropia

$$S = -k_B \text{Tr} (\hat{\rho} \ln \hat{\rho}), \quad (2.19)$$

utilizamos novamente o argumento que leva à equação (2.17) para calcular de fato, a matriz densidade referente a um spin em nosso sistema. Como estamos interessados em

apenas um sítio da rede, definimos o campo efetivo deste sítio por  $\mathbf{h}_{ef}$ . Em um *ensemble* no formalismo canônico, escrevemos

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0}, \quad (2.20)$$

onde  $\mathcal{Z}$  é a função partição (*Zustandssumme*), que determina as propriedades estatísticas de um sistema em equilíbrio termodinâmico no formalismo canônico. Para calcular a função partição nesta aproximação de campo médio variacional, aplicamos o traço em ambos os lados da equação (2.20) e utilizamos a propriedade de normalização da matriz densidade para obter

$$\text{Tr} \left( \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta \mathcal{H}_0} \right) = 1. \quad (2.21)$$

Por estarmos tratando com spins de Heisenberg contidos em  $\mathbf{R}^3$ , escrevemos o traço a partir de uma integral em  $d\Omega$  no espaço. Transformando de coordenadas cartesianas para coordenadas polares e utilizando corretamente o Jacobiano da transformação encontramos

$$\mathcal{Z} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{\beta h_{ef} m_s \cos\theta}, \quad (2.22)$$

no qual  $m_s$  representa o módulo de  $\mathbf{S}_r$  e o produto escalar é efetuado pelo alinhamento de  $\mathbf{S}_r$  com o campo efetivo  $\mathbf{h}_{ef}$ . A integral para o ângulo azimutal pode ser resolvida de maneira imediata e possui o valor de  $2\pi$ , enquanto a integração no ângulo polar é resolvida após uma substituição simples de variáveis resultando em

$$\mathcal{Z} = \frac{4\pi}{m_s \beta h_{ef}} \sinh(m_s \beta h_{ef}). \quad (2.23)$$

Como  $h_{ef}$  é um parâmetro variacional externo, procuramos conecta-lo com um parâmetro variacional que seja mais apropriado à descrição do sistema. Com este objetivo, calculamos a média da magnetização local do sistema

$$\langle \mathbf{m} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{\beta h_{ef} m_s \cos\theta} m_s \cos\theta \left( \frac{\mathbf{S}_r}{|\mathbf{S}_r|} \right), \quad (2.24)$$

de maneira semelhante à integral em (2.22), a parte azimutal da integração é obtida de forma imediata, enquanto que a parte angular é resolvida através de uma integração por partes. Utilizamos a função partição (2.23) para obter por fim

$$\langle \mathbf{m} \rangle = m_s \left[ \coth(m_s \beta h_{ef}) - \frac{1}{m_s \beta h_{ef}} \right] \left( \frac{\mathbf{S}_r}{|\mathbf{S}_r|} \right). \quad (2.25)$$

De (2.19), podemos agora reescrever a entropia em termos da magnetização média do sistema e de sua função partição

$$S = -k_B (m_s \beta \mathbf{h}_{ef} \cdot \langle \mathbf{m} \rangle - \ln \mathcal{Z}), \quad (2.26)$$

buscamos escrevê-la agora como um funcional da magnetização, assim como fizemos com a parte energética do sistema. Tomamos como variável adimensional  $\nu = m_s \beta h_{ef}$  e observamos que a expressão em (2.25) pode ser reescrita em

$$\langle \mathbf{m} \rangle = m_s \left[ \coth(\nu) - \frac{1}{\nu} \right] \left( \frac{\mathbf{S}_r}{|\mathbf{S}_r|} \right). \quad (2.27)$$

No regime em que  $\nu \ll 1$ , expandimos (2.27) e invertemos a série resultante com a ajuda do software *Mathematica* para obter uma expressão do tipo  $\nu(\langle \mathbf{m} \rangle)$ . Deste modo, podemos escrever por fim (2.26) em um funcional entropia a partir da magnetização média do sistema. O seu comportamento é dado por

$$S[\langle \mathbf{m} \rangle] = \ln 4\pi - \frac{3}{2} |\langle \mathbf{m} \rangle|^2 - \frac{9}{20} |\langle \mathbf{m} \rangle|^4 + \dots \quad (2.28)$$

Como  $|\langle \mathbf{m} \rangle| \in [0, 1]$ , plotamos o funcional entropia em relação ao módulo do vetor magnetização local para analisar seu comportamento (figura 11).

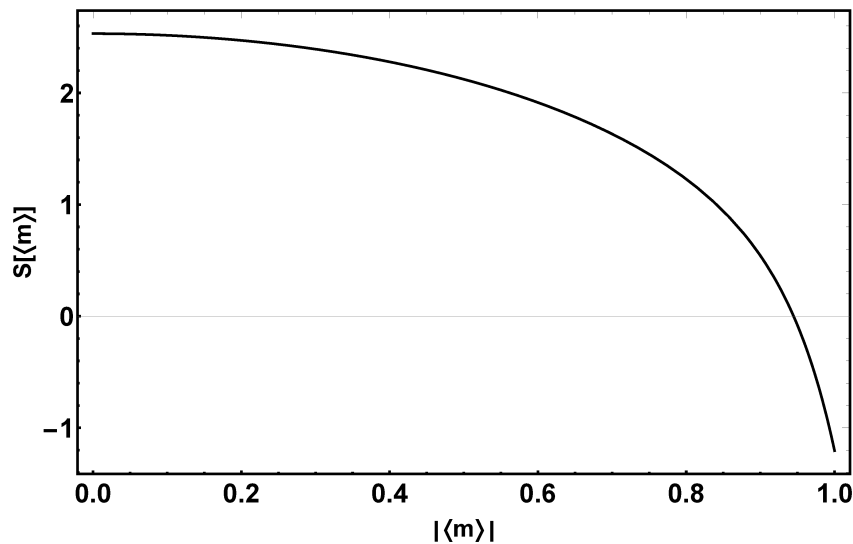


Figura 11 – Plot do funcional entropia (2.28) em relação ao módulo da magnetização do sistema.

A região no qual a entropia é negativa, observada na figura 11, é um efeito espúrio produzido pela natureza clássica do modelo de dipolos utilizado. Conforme o campo aplicado aos dipolos aumenta, o espaço de fases acessível ao sistema diminui. Isto se deve ao fato de que quanto maior o campo aplicado, mais difícil se torna para os dipolos explorarem inclinações significativas em relação ao campo aplicado, o que explica o motivo pelo qual o volume do espaço de fases é uma função monótona decrescente do campo aplicado cujo limite inferior é nulo. É interessante notar que se o modelo considerado fosse quântico, onde o spin assume valores discretos, o volume do espaço de fases do sistema ou equivalentemente, o número de microestados acessíveis, seria uma quantidade limitada inferiormente ao valor um. Esta situação corresponde ao estado no qual é aplicado ao sistema um campo externo arbitrariamente grande, de forma que, o único microestado acessível seria aquele no qual todos os spins estão alinhados na direção do campo. Neste

caso, a forma funcional da entropia recuperaria o seu comportamento usual positivo definido. Com o funcional entropia determinado, podemos escrever por fim o funcional energia livre

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\mathbf{m}(\mathbf{r})] = & -J \sum_r \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \left( \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{x}) + \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{y}) \right) - \mathbf{h} \cdot \sum_r \mathbf{m}(\mathbf{r}) \\ & - D \sum_r \left[ (\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{x})) \cdot \hat{x} + (\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{y})) \cdot \hat{y} \right] \\ & + b \sum_r (\hat{z} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 - TS[\mathbf{m}(\mathbf{r})], \end{aligned} \quad (2.29)$$

através de um parâmetro de caráter variacional  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ , sendo a entropia descrita por (2.28). É importante notar que a entropia é construída em até ordem mil na expansão destacada em (2.28), onde com a ajuda do software *mathematica*, construímos uma lista de pares ordenados fornecendo valores para o módulo da magnetização. Por fim, interpolamos a lista de pares ordenados para criar uma expressão para o funcional entropia em relação a magnetização local do sistema. Com isto, obtemos o funcional energia e concluimos a aplicação de campo médio variacional em nosso modelo. O funcional (2.29) ainda está em sua versão discreta, localizada em em uma rede infinita em duas dimensões. No capítulo 3 faremos uma aproximação em longos comprimentos de onda para obter uma forma contínua, que nos permitirá descrever as texturas magnéticas através de suas modulações no capítulo 4 e conseqüentemente construir o diagrama de fases deste sistema.

A próxima seção tem como objetivo evidenciar diversos resultados acerca de transições de fase na matéria condensada, em especial as transições de fase topológicas. Estes resultados serão aplicados ao longo deste trabalho para a construção e análise do diagrama de fases.

## 2.3 TRANSIÇÕES DE FASE

Em nosso cotidiano, estamos cercados por diversos materiais e substâncias que se encontram em diferentes estados da matéria. O exemplo mais familiar é o da água, encontrada em três diferentes formas em nosso dia a dia, que identificamos como o estado sólido, líquido e gasoso. Uma fase termodinâmica pode ser estudada e analisada através de potenciais termodinâmicos, que são capazes de identificar o estado termodinâmico de menor energia livre do sistema. Um diagrama de fases é dado por um gráfico do espaço de parâmetros de interesse, onde a cada ponto deste espaço associa-se à fase termodinâmica na qual o sistema se encontra.

Outra importante quantidade física que caracteriza a fase termodinâmica de um sistema é associada ao parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem assume um valor não nulo em uma fase ordenada e desaparece em uma fase desordenada. Contrário à intuição inicial, uma fase desordenada representa um estado de maior simetria no sistema

do que uma fase ordenada. Em sistemas magnéticos, é comum que a magnetização, uma quantidade macroscópica oriunda do elemento microscópico de spin, assuma o papel de parâmetro de ordem, evidenciado em nosso funcional energia livre (2.29). Uma transição de fase é um fenômeno que evidencia mudanças drásticas no comportamento do sistema. Devido à natureza das transições, classificamo-as de maneiras distintas. Uma transição de primeira ordem ou descontínua, tem como principal característica a liberação ou absorção de calor latente durante a transição, enquanto uma transição contínua apresenta divergência na susceptibilidade do sistema e um comprimento de correlação infinito. Ainda em transições contínuas, existem as transições de fase topológicas, que são caracterizadas pela proliferação de defeitos topológicos no sistema.

Discutimos na próxima seção a classificação de uma transição de fase de primeira ordem e uma transição de fase contínua. Escolhemos discutir as transições através de uma abordagem histórica, passando pela classificação de Ehrenfest, até a evolução dos seus conceitos na classificação moderna. Dentro da classificação moderna, discutimos quais tipos de transição são esperadas para o nosso modelo a partir das considerações de campo médio. Em seguida, dissertamos sobre a teoria *KTHNY* e a transição de fase topológica mediada pela proliferação de defeitos topológicos no sistema. Este estudo será utilizado para identificar as fases topológicas em nossos diagramas no capítulo 5.

### 2.3.1 Transição de Fase de Primeira Ordem e Contínua

Em 1933, Paul Ehrenfest introduziu em primeira instância um esquema compreensivo para a classificação de transições de fase, conhecida hoje como a classificação de Ehrenfest [77]. Esta classificação se tornou necessária devido à descoberta de um tipo diferente de transição envolvendo o Hélio em meados dos anos 1920, chamada de transição *lambda* devido ao comportamento do seu calor específico lembrar a letra grega  $\lambda$ , que conhecemos hoje como uma transição do *He* superfluido (*He* II) para um fluido (*He* I). Diferente da transição de fase conhecida previamente, esta não apresentava calor latente e demonstrava uma descontinuidade em segunda ordem na derivada da energia livre. Esta nova transição foi classificada por Ehrenfest como uma transição de segunda ordem, diferente das transições ordinárias previamente conhecidas, que receberam o nome de transições de primeira ordem.

A classificação foi baseada em argumentos matemáticos a partir da energia livre de Gibbs

$$G(T, P) = E - TS + PV, \quad (2.30)$$

onde  $E$  é a energia interna,  $T$  a temperatura,  $P$  a pressão e  $V$  o volume. A ideia consistia na construção de curvas de Gibbs em um diagrama  $P - T$ ; quando pelo menos uma primeira derivada de  $G$  era descontínua, recebia o nome de transição de fase de primeira ordem. Uma transição de segunda ordem surgia quando não havia nenhuma descontinuidade na

energia livre de Gibbs ou em suas primeiras derivadas, mas sim em alguma propriedade relacionada à segunda derivada de  $G$ . Eventualmente a classificação se tornou insatisfatória. A própria transição  $\lambda$  não se encaixava na descrição de Ehrenfest, esta dificuldade não era exclusiva de sistemas superfluidos, pois surgia também em classificar a transição em sistemas magnéticos. O problema consistia em identificar corretamente a divergência das derivadas nestes sistemas.

Outra importante teoria que surgiu na mesma época, com o objetivo de tratar deste novo tipo de transição, é atribuída a Lev Landau [78]. Suas considerações eram baseadas em argumentos de simetria da energia livre de Helmholtz. De uma perspectiva da aproximação de campo médio, ao escrevermos a energia livre, esperamos que ela seja uma função analítica de seus parâmetros e obedeça as simetrias impostas pelo seu hamiltoniano. Dadas estas condições, é possível escrever uma expressão na vizinhança do ponto crítico utilizando uma expansão de Taylor do seu parâmetro de ordem. A teoria de Landau se torna útil no cálculo de expoentes críticos do sistema, dada que as considerações de simetria geram classes de universalidade.

Uma classificação mais moderna sugere a presença de calor latente para as transições de primeira ordem. Durante o processo, o sistema libera ou absorve energia e a sua temperatura se mantém constante. Enquanto calor está sendo extraído ou adicionado, o sistema se encontra em um estado de coexistência de fases. Como exemplo de uma transição de primeira ordem, destacamos a transição da água de sólido para líquido. O que era classificado por Ehrenfest como uma transição de segunda ordem, atualmente é denominada de transição contínua. Caracterizada por uma divergência na susceptibilidade, um comprimento de correlação infinito e um comportamento exponencial distinto da função de correlação perto da criticalidade do sistema. Um exemplo deste tipo de transição é a transição de um estado ferromagnético para um estado paramagnético. Devido a sua estabilidade topológica, estruturas moduladas como os *skyrmions* e a textura magnética helicoidal não podem ser deformadas continuamente em outras configurações. Desta forma, esperamos encontrar transições de primeira ordem [3, 34] neste tipo de sistema.

Embora tenha existido historicamente um debate sobre as características do que conhecemos hoje como transições de primeira ordem e transições contínuas, não existem apenas estas duas possibilidades, outro tipo de transição foi identificada pelo estudo do derretimento de sólidos bidimensionais. Esta transição é caracterizada pela proliferação de defeitos topológicos e é responsável pelo surgimento de uma fase intermediária conhecida como hexática. Discutiremos as implicações do cenário *KTHNY* na próxima seção deste capítulo.

### 2.3.2 Transições de Fase Topológicas

Defeitos topológicos são distorções em um sistema com simetria contínua quebrada, que surgem devido a imposição de condições de contorno, flutuações térmicas ou agentes

externos. Eles assumem um papel fundamental na matéria condensada moderna [79], já que não podem desaparecer ou serem modificados por nenhuma deformação contínua do parâmetro de ordem. Por este motivo, são ditos topologicamente estáveis. Estabilidade topológica é um conceito matemático distinto da estabilidade física de uma configuração, o qual em geral depende da energia livre do sistema. Entretanto, em muitos casos, estabilidade topológica implica em estabilidade física.

Estes defeitos topológicos são especialmente importantes no estudo de sistemas em duas dimensões, onde segundo a teoria *KTHNY* [51–53], as flutuações térmicas geradas pelo aumento da temperatura são capazes de proliferar os defeitos pelo sistema. Um dos resultados mais surpreendentes deste estudo surge da existência de uma nova fase intermediária entre a sólida e a líquida, conhecida como fase hexática. A fase hexática apareceu pela primeira vez em um modelo de derretimento de redes bidimensionais, proposto independentemente por Kosterlitz, Thoules [80] e Berezinskii [81, 82]. Diferente de uma estrutura cristalina, a configuração hexática possui uma ordem posicional de curto alcance e uma ordem orientacional de quase longo alcance, observada em cristais líquidos bidimensionais [83], cristais coloidais [84, 85], sistemas magnéticos com padrões de bolhas [86] e filmes de Langmuir [87].

Com o objetivo de encontrar uma descrição mais detalhada de nossos diagramas, precisamos ir além dos resultados de campo médio e incluir os efeitos destas flutuações, associadas à energia de fônons e aos defeitos topológicos do sistema. Estudamos agora na seção final deste capítulo, uma série de resultados do derretimento de sistemas bidimensionais relacionados a uma textura magnética de faixas e a uma rede cristalina triangular.

## 2.4 DERRETIMENTO DE SISTEMAS BIDIMENSIONAIS

Dada a presença de fortes flutuações térmicas em sistemas bidimensionais, observamos uma dificuldade de formação de estruturas cristalinas [88, 89]. Esta é uma importante consideração no estudo de sólidos em duas dimensões, onde a ordem posicional tende a se manifestar fracamente. Os resultados do derretimento em redes triangulares bidimensionais [90–93] podem ser utilizados para estudar as propriedades topológicas de texturas magnéticas em duas dimensões, como veremos a seguir. Descrevemos as fases topológicas através de suas simetrias, que relacionamos a ordem posicional e orientacional das texturas. Ao considerarmos o efeito de pequenas flutuações (fônons) em nosso sistema, identificamos um hamiltoniano elástico efetivo que será usado no estudo de flutuações relacionadas aos defeitos topológicos. Em seguida, utilizaremos o grupo de renormalização para analisar as equações de fluxo, relacionadas a fugacidade  $y$  e a rigidez  $K$  das estruturas moduladas. Este grupo de equações diferenciais contém a informação necessária para identificarmos as transições mediadas pelos seus respectivos defeitos topológicos. O objetivo desta seção final,



consiste em descrever um ferramental necessário para que no capítulo 5 desta dissertação, seja possível analisar as propriedades topológicas sobre a ótica da teoria do derretimento em duas dimensões em nosso modelo.

### 2.4.1 Estudo do derretimento de um sistema de faixas

Veremos nesta seção, que a inclusão de pequenas flutuações em uma textura magnética de faixas gera um hamiltoniano elástico efetivo [92,93]. Em seguida, consideramos a presença de defeitos topológicos na textura, que chamamos de deslocamentos (figura 12), onde analisamos a ordem orientacional do sistema e identificamos um comportamento similar ao do modelo  $XY$  [14, 51, 94]. Como consequência, encontramos a baixas temperaturas uma textura de faixas com ordem posicional local e uma ordem orientacional de quase longo alcance. Enquanto aumentamos a temperatura do sistema, passamos desta configuração de faixas para uma que possui ordem posicional e orientacional local, análoga a um líquido isotrópico, que compartilha a mesma classe de simetrias de uma configuração magnética homogênea. A primeira destas fases, possui uma descrição com uma classe de simetrias mais próxima de um sólido que a segunda.

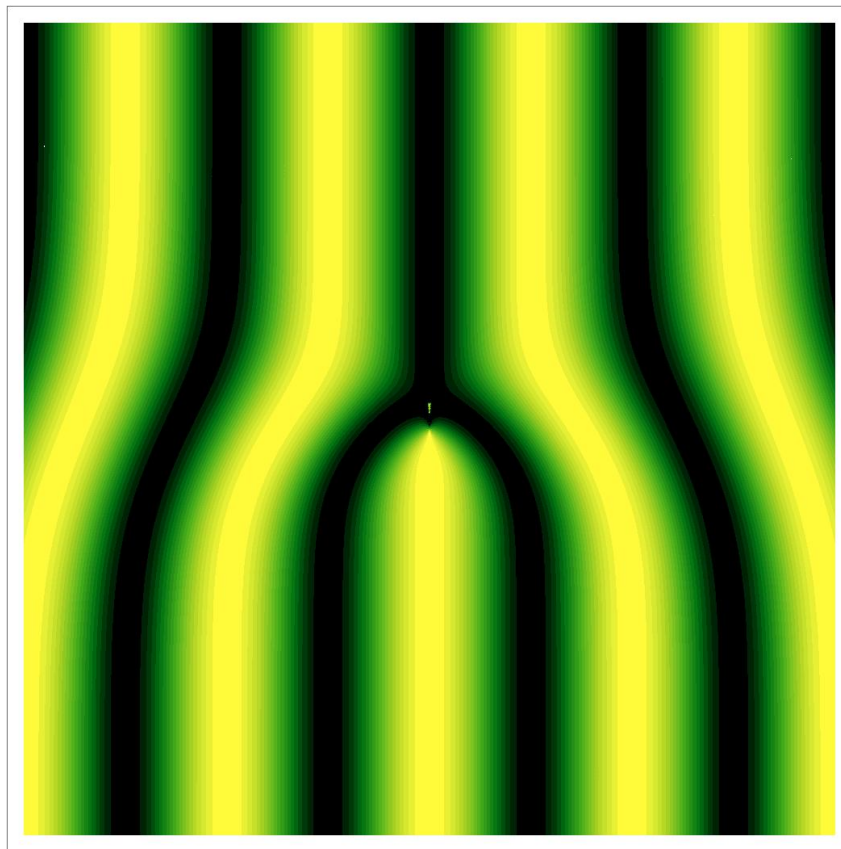


Figura 12 – Imagem qualitativa de uma deslocação em uma textura magnética de faixas, retirada e editada da referência [13].

Uma textura de faixas em geral, pode ser descrita por uma magnetização local do

tipo

$$m(\mathbf{x}) = C \cos(k_0 x), \quad (2.31)$$

onde  $C$  é a amplitude de oscilação da modulação e  $k_0$  o seu vetor de onda característico. Para estudar as propriedades topológicas desta textura, consideramos um campo de deformação  $u(\mathbf{x})$  que perturba nossa solução da seguinte maneira

$$m(\mathbf{x}) = C \cos\left(k_0 x + k_0 u(\mathbf{x})\right). \quad (2.32)$$

É importante notar que se  $u(\mathbf{x}) \rightarrow 0$ , recuperamos a modulação em (2.31). Considerando a solução perturbada em (2.32), podemos mostrar que a diferença energética entre um estado perturbado e um estado não perturbado nos leva a um hamiltoniano elástico efetivo [92, 93] do tipo

$$\Delta\mathcal{H}_{el} = \frac{1}{2} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[ Bk_x^2 + B\lambda^2 k_y^4 \right] \hat{u}(\mathbf{k}) \hat{u}(-\mathbf{k}), \quad (2.33)$$

onde as constantes elásticas  $B$  e  $B\lambda^2$  podem ser determinadas a partir de  $C$  e do seu vetor de onda característico  $k_0$ . Este hamiltoniano nos permite analisar as propriedades elásticas da textura magnética de faixas. A correlação do campo de deformação  $\langle u(\mathbf{x})^2 \rangle$  diverge no limite termodinâmico, o que implica em uma instabilidade para a ordem posicional da textura de faixas. Por outro lado, ao analisarmos a orientação  $\partial_y u(\mathbf{x})$  do sistema de faixas na região de baixas temperaturas, percebemos que o sistema possui uma configuração com ordem orientacional de quase longo alcance [92]. A inclusão de defeitos topológicos [92] para a configuração sólida em longos comprimentos de onda implica que um hamiltoniano orientacional efetivo pode ser escrito para o sistema, semelhante ao modelo  $XY$  [14, 51, 94] descrito por

$$\mathcal{H}_{ef} = \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{r} K_o \left( \nabla\theta(\mathbf{r}) \right)^2, \quad (2.34)$$

sendo a rigidez orientacional  $K_o$  do sistema estimada [92] por

$$K_o = \frac{B\lambda^2 + 2E_d}{2}, \quad (2.35)$$

onde  $E_d$  representa a energia do defeito topológico (deslocação). A partir da semelhança com o modelo  $XY$ , escrevemos a equação de fluxo [90, 92, 95] para a rigidez  $K$  e a fugacidade  $y$  do sistema

$$\begin{aligned} dK(l)/dl &= -4\pi K(l)y^2(l); \\ dy(l)/dl &= (2 - \pi K(l))y(l), \end{aligned} \quad (2.36)$$

com as grandezas não renormalizadas definidas por

$$y(0) = e^{-E_c/k_B T} ; K(0) = \frac{K_o}{k_B T}, \quad (2.37)$$

sendo  $E_c$  a energia do defeito topológico associado ao modelo  $XY$  (vórtices). Se conseguíssemos estimar o valor destas constantes, poderíamos resolver as equações de fluxo e encontrar a rigidez renormalizada associada à textura de faixas. O comportamento desta rigidez poderia então, ser utilizado para identificar uma transição de fase topológica dentro desta textura, sinalizando que a ordem orientacional de quase longo alcance foi destruída, ou seja, o sistema possui rigidez orientacional nula e se encontra em uma fase com ordem posicional e orientacional local.

No capítulo 5, vamos considerar um campo de deformação no padrão de faixas de nossa solução helicoidal, onde encontraremos propriedades elásticas semelhantes ao que discutimos nesta seção. Após estimar a energia dos defeitos topológicos, vamos estudar a transição de fase topológica em nossa textura magnética helicoidal.

## 2.4.2 Estudo do derretimento de uma rede triangular

Como veremos no capítulo 5, a inclusão de defeitos topológicos em uma textura magnética de bolhas, neste caso *skyrmions*, nos leva a um hamiltoniano elástico efetivo que descreve uma rede triangular em duas dimensões. Como consequência, podemos aplicar os resultados do derretimento de sistemas bidimensionais, onde esperamos encontrar uma distinção entre a fase sólida, hexática e líquida em nossa textura de *skyrmions*. Neste caso, as transições são mediadas pela proliferação de defeitos topológicos no sistema.

Estes defeitos topológicos podem ser identificados a partir de um mecanismo simples, conhecido como circuito de Burger. O procedimento consiste em realizar um circuito sobre a rede de sítio em sítio que, em uma rede perfeita, retorna ao ponto inicial. Se algum defeito estiver contido no circuito, o ponto inicial não é atingido novamente e a diferença entre o sítio inicial e o final define o vetor de Burger  $\mathbf{b}$ , como pode ser observado na figura 13.

O hamiltoniano elástico efetivo que descreve um campo de deformações  $u(\mathbf{r})$  de duas componentes em uma rede triangular bidimensional [51, 79, 90, 92, 95, 96] é dado por

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{H}_{el} = & \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[ (2\mu + \lambda)k_x^2 + \mu k_y^2 \right] \hat{u}_x(\mathbf{k}) \hat{u}_x(-\mathbf{k}) + \\ & \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[ \mu k_x^2 + (2\mu + \lambda)k_y^2 \right] \hat{u}_y(\mathbf{k}) \hat{u}_y(-\mathbf{k}) + \\ & \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} (2\mu + 2\lambda) k_x k_y \hat{u}_x(\mathbf{k}) \hat{u}_y(-\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde  $\mu$  e  $\lambda$  são os coeficientes elásticos, também conhecidos como coeficientes de Lamé da rede triangular. No derretimento deste tipo de rede, a teoria *KTHNY* prediz uma

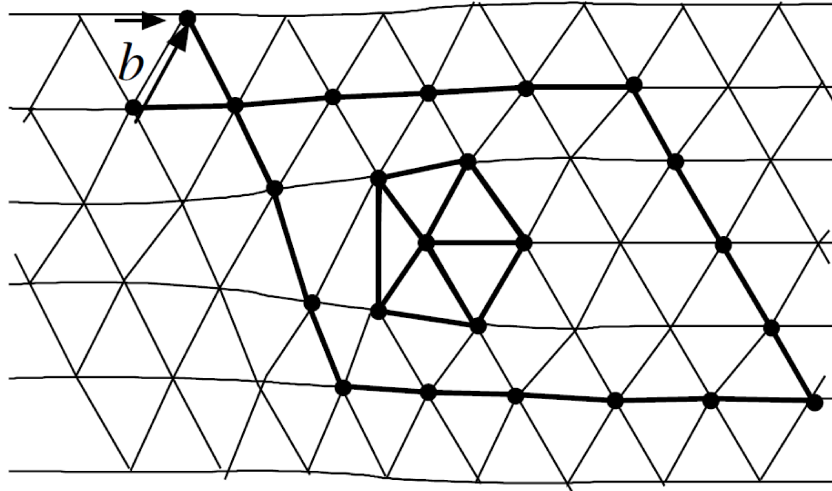


Figura 13 – Vetor de Burger em uma rede triangular [14].

sequência de duas transições até chegarmos a fase isotrópica líquida. Na região de baixas temperaturas, o sistema possui ordem orientacional de longo alcance e ordem posicional de quase longo alcance, caracterizando um sólido em duas dimensões. Quando a temperatura aumenta, a ordem posicional torna-se local, porém, a ordem orientacional continua correlacionada através de uma lei de potências; este comportamento caracteriza a fase intermediária hexática. Ao aumentarmos ainda a temperatura, o sistema passa desta fase para uma que possui ordem orientacional e posicional de curto alcance, descrita por um líquido isotrópico.

Como evidenciado na literatura [95], a transição da fase sólida bidimensional para a fase hexática é dada pela proliferação de defeitos no sistema, onde podemos escrever a parte singular do hamiltoniano devido as deformações por

$$\Delta\mathcal{H}_D = -\frac{K_D}{8\pi a_d^4} \int d^2\mathbf{r} d^2\mathbf{r}' \left[ \mathbf{b}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{r}') \ln \left( \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{a_d} \right) - \frac{\mathbf{b}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{b}(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \right] + E_D \int d^2\mathbf{r} \frac{|\mathbf{b}(\mathbf{r})|^2}{a_d^2}, \quad (2.39)$$

onde  $\mathbf{b}(\mathbf{r})$  é o vetor de Burger,  $a_d$  representa o *cut-off* de curtas distâncias, que é interpretado como a distância mínima entre um par de defeitos, enquanto  $E_D$  é a energia de um defeito topológico e  $K_D$  uma constante elástica. A constante elástica  $K_D$  é definida [91, 95] por

$$K_D = \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda} a^2, \quad (2.40)$$

sendo  $a$  o parâmetro de rede do sistema. A aplicação adequada do grupo de renormalização em (2.39) nos leva ao seguinte grupo de equações [51, 79, 90, 92, 95, 96] diferenciais de fluxo

de renormalização para a rigidez  $K$  e a fugacidade  $y$  do sistema

$$\begin{aligned}\frac{dK(l)}{dl} &= -K^2(l) \left[ \frac{3\pi}{2} y^2(l) I_0 \left( \frac{K(l)}{8\pi} \right) e^{K/8\pi} - \frac{3\pi}{4} y^2(l) I_1 \left( \frac{K(l)}{8\pi} \right) e^{K/8\pi} \right]; \\ \frac{dy(l)}{dl} &= \left( 2 - \frac{K(l)}{8\pi} y(l) \right) + 2\pi y^2(l) I_0 \left( \frac{K(l)}{16\pi} \right) e^{K/8\pi},\end{aligned}\quad (2.41)$$

onde  $I_{0,1}$  representa a função de Bessel modificada e novamente definimos as grandezas não renormalizadas por

$$K(0) = \frac{K_D}{k_B T}; \quad y(0) = e^{-E_D/k_B T}, \quad (2.42)$$

sendo  $E_d$  a energia dos defeitos topológicos no sistema. Uma estimativa do valor destas constantes no capítulo 5 nos permitirá calcular a rigidez  $K$  e identificar a transição de fase de um sólido bidimensional para uma fase hexática.

Enquanto a ordem orientacional é mantida na fase hexática, podemos descrevê-la através de um hamiltoniano efetivo [91, 95] do tipo  $XY$  na aproximação de longos comprimentos de onda

$$\mathcal{H}_{ef} = \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{r} K_A (\nabla\theta(\mathbf{r}))^2. \quad (2.43)$$

A constante de Franck  $K_A$  é calculada [90, 95] por

$$K_A = 2E_D \left( \frac{2\xi_D}{a_l} \right)^2, \quad (2.44)$$

sendo  $a_l$  o *cut-off* de curtas distâncias do sistema e  $\xi_D$  o comprimento de correlação. Como o comportamento efetivo desta fase é semelhante ao do modelo  $XY$  nesta aproximação, recuperamos as equações de fluxo de renormalização em (2.36). De onde escrevemos as grandezas não renormalizadas

$$K(0) = \frac{K_A}{k_B T}; \quad y(0) = e^{-E_A/k_B T}, \quad (2.45)$$

onde  $E_A$  representa a energia dos defeitos topológicos. Novamente, ao estimarmos os valores destas constantes, podemos determinar e analisar a rigidez  $K$  para identificar a transição da fase hexática para a fase líquida. Estes resultados serão utilizados no estudo topológico da textura magnética de *skyrmions* no capítulo 5 deste trabalho.

## 3 FUNCIONAL ENERGIA LIVRE

Após ter construído e revisado os resultados de interesse para esta dissertação, nos dedicamos neste capítulo à construção de um funcional energia livre adimensional, para que ele possa receber um tratamento numérico apropriado no capítulo 4. Para alcançar este objetivo, procuramos uma forma contínua do funcional (2.29), através de uma aproximação em longos comprimentos de onda, onde consideramos que a variação de nosso parâmetro de ordem ocorre de maneira suave no espaço, e desta forma, pode ser descrita continuamente. Em seguida, vamos encontrar uma descrição adimensional de nosso funcional, definindo escalas de temperatura e energia através das grandezas que descrevem nosso sistema. A análise adimensional assumirá um papel fundamental no estudo numérico do funcional e na conseqüente construção do diagrama de fases nesta aproximação de campo médio variacional.

### 3.1 MODELO CONTÍNUO

Como estamos interessados em construir e analisar o diagrama de fases de um sistema que possui a interação de Dzyaloshinskii-Moriya, devemos obter o funcional (2.29) em sua forma contínua. Para construir este funcional, utilizamos uma transformada de Fourier discreta em duas dimensões. No limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), temos uma rede infinita e portanto, definimos a transformada por

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}=-\infty}^{\infty} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

e conseqüentemente a sua anti-transformada em duas dimensões

$$f(\mathbf{r}) = a^2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{f}(\mathbf{k}), \quad (3.2)$$

onde integramos no espaço recíproco sobre a primeira zona de Brillouin e  $a$  representa o espaçamento da rede. Com a definição de transformada e anti-transformada, podemos calcular a versão contínua de cada termo de nosso hamiltoniano (2.18). Como passo inicial, faremos a transformação do termo de interação de troca ferromagnética, que em nosso modelo, descrevemos por

$$H_{ex} = -J \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \left( \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{x}}) + \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{y}}) \right), \quad (3.3)$$

lidaremos a princípio apenas com o termo  $H_{\hat{\mathbf{x}}ex} = \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{x}})$  referente à direção  $\hat{\mathbf{x}}$  em nosso plano, pois por semelhança, vamos obter uma expressão para a direção  $\hat{\mathbf{y}}$ . Deste modo, escrevemos  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  e  $\mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{x}})$  a partir de sua anti-transformada (3.2) resultando

em

$$H_{\hat{x}ex} = a^4 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^2 \mathbf{k} d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^4} \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}' \cdot \hat{\mathbf{x}}} \sum_{r=-\infty}^{\infty} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}}. \quad (3.4)$$

A soma em (3.4) pode ser escrita a partir de uma Delta de Kronecker entre  $\mathbf{k}$  e  $\mathbf{k}'$ . Como a rede é infinita (limite termodinâmico), transformamos esta Delta de Kronecker em uma Delta de Dirac entre  $\mathbf{k}$  e  $\mathbf{k}'$  no contínuo para escrever

$$H_{\hat{x}ex} = a^2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^2 \mathbf{k} d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}' \cdot \hat{\mathbf{x}}} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}'). \quad (3.5)$$

Usamos aqui uma aproximação em longos comprimentos de onda, isto significa que nosso parâmetro de ordem  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  não possui variação significativa em pequenas escalas de comprimento. Desta forma, aproximamos nossos limites de integração sobre todo o espaço recíproco e recorreremos à propriedade de filtragem da delta de Dirac juntamente com o fato de que  $\hat{\mathbf{m}}(-\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{m}}^*(\mathbf{k})$ , provado imediatamente a partir de (3.1), para encontrar

$$H_{\hat{x}ex} = a^2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} |\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})|^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}}. \quad (3.6)$$

Escrevemos a exponencial a partir de funções trigonométricas utilizando a fórmula de Euler. Como a função  $\sin(x)$  é ímpar e a integral é realizada sobre um intervalo simétrico com uma função par  $|\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})|^2$ , sabemos que este termo não contribui para a integral, tendo resultado nulo. Sendo  $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}} = k_x a$  e dado que na aproximação em longos comprimentos de onda temos que  $k_x a \ll 1$ , expandimos a função cosseno até primeira ordem não trivial

$$H_{\hat{x}ex} = a^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} |\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})|^2 \left[ \frac{1}{a^2} - \frac{k_x^2}{2} \right], \quad (3.7)$$

e por semelhança, escrevemos para a direção  $\hat{\mathbf{y}}$ ,

$$H_{\hat{y}ex} = \sum_r \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{y}}) = a^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} |\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})|^2 \left[ \frac{1}{a^2} - \frac{k_y^2}{2} \right]. \quad (3.8)$$

Para a interação de troca ferromagnética total temos

$$H_{ex} = Ja^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} |\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})|^2 \left[ \frac{\mathbf{k}^2}{2} - \frac{2}{a^2} \right] \quad (3.9)$$

onde o termo constante de (3.9) é imediatamente obtido no espaço real através de sua anti-transformada. Para encontrar o termo que depende de  $\mathbf{k}$  no espaço real, utilizamos o fato de que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^2 \mathbf{r} (\nabla f(\mathbf{r}))^2 = a^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \mathbf{k}^2 |\hat{f}(\mathbf{k})|^2, \quad (3.10)$$

obtendo por fim, a interação de troca ferromagnética no espaço real em sua versão contínua

$$\mathcal{H}_{ex} = \int_{-\infty}^{\infty} d^2 \mathbf{r} \left[ \frac{J}{2} (\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 - \frac{2J}{a^2} |\mathbf{m}(\mathbf{r})|^2 \right]. \quad (3.11)$$

Faremos o uso do mesmo procedimento para encontrar a interação de Dzyaloshinskii-Moriya em sua forma contínua, de modo que agora, a expressão que nos interessa no hamiltoniano é dada por

$$H_{DM} = -D \sum_r \left[ (\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{x}})) \cdot \hat{\mathbf{x}} + (\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{m}(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{y}})) \cdot \hat{\mathbf{y}} \right]. \quad (3.12)$$

De forma análoga, podemos calcular a transformada para a direção  $\hat{\mathbf{x}}$  e por semelhança, encontrar uma expressão para a direção  $\hat{\mathbf{y}}$ . Utilizamos portanto, a definição (3.2) para escrever

$$H_{\hat{\mathbf{x}}DM} = -a^4 D \hat{\mathbf{x}} \cdot \left[ \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^2 \mathbf{k} d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^4} e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} (\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k}') \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})) \right] \sum_{\mathbf{r}=-\infty}^{\infty} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.13)$$

utilizando novamente a delta de Dirac e a aproximação em longos comprimentos de onda, integramos sobre uma das variáveis para encontrar

$$H_{\hat{\mathbf{x}}DM} = -a^2 D \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} \hat{\mathbf{x}} \cdot (\hat{\mathbf{m}}(-\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})). \quad (3.14)$$

Como agora  $\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{m}}(-\mathbf{k})$  é uma função ímpar, apenas o seno sobreviverá a integração sobre todo o espaço após utilizarmos a fórmula de Euler. Sabendo que  $k_x a \ll 1$ , expandimos o seno até primeira ordem não-trivial para obter

$$H_{\hat{\mathbf{x}}DM} = a^2 D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} (-iak_x \hat{\mathbf{x}}) \cdot (\hat{\mathbf{m}}(-\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})), \quad (3.15)$$

por semelhança, para a transformação em  $\hat{\mathbf{y}}$  temos

$$H_{\hat{\mathbf{y}}DM} = a^2 D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} (-iak_y \hat{\mathbf{y}}) \cdot (\hat{\mathbf{m}}(-\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})). \quad (3.16)$$

Como  $\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}$ , escrevemos enfim, o termo completo de Dzyaloshinskii-Moriya no espaço recíproco

$$H_{DM} = a^2 D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} (-iak) \cdot (\hat{\mathbf{m}}(-\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})). \quad (3.17)$$

Torna-se necessário neste momento reescrever (3.17) no espaço real, e para isso, observamos que

$$\nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r}) = a^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} (i\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.18)$$

e portanto, realizamos a seguinte transformada de Fourier

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^2 \mathbf{r} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r})) = a^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k}) \cdot (-i\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{m}}(-\mathbf{k})). \quad (3.19)$$



Recorremos à propriedade do produto escalar triplo para reorganizar (3.19) em

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{r} \, \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r})) = a^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} (-i\mathbf{k}) \cdot (\hat{\mathbf{m}}(-\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{k})), \quad (3.20)$$

onde reconhecemos (3.17) e escrevemos a interação de Dzyaloshinskii-Moriya no espaço real em sua versão contínua

$$\mathcal{H}_{DM} = \frac{D}{a} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{r} \, \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r})). \quad (3.21)$$

O mesmo procedimento é realizado para os termos referentes ao campo magnético externo e a anisotropia em nosso modelo. Como o resultado de ambos é obtido de forma trivial, escrevemos por fim, o hamiltoniano completo para o espaço real em sua forma contínua

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{r} \left[ \frac{J}{2} (\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 + \frac{D}{a} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r})) \right. \\ \left. - \frac{1}{a^2} \mathbf{h} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}) - \frac{2J}{a^2} |\mathbf{m}(\mathbf{r})|^2 + \frac{b}{a^2} |\mathbf{m}_z(\mathbf{r})|^2 \right], \end{aligned} \quad (3.22)$$

com  $a$  assumindo o papel do espaçamento da rede enquanto  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  é a magnetização local do sistema, representando o parâmetro de ordem em nossa análise de campo médio variacional. Com o hamiltoniano em sua forma contínua definido por (3.22), voltamos a nossa atenção para a construção de um funcional completamente adimensional para a energia livre. A adimensionalização deste funcional nos permitirá analisar e construir numericamente o diagrama de fases deste modelo no capítulo 4.

## 3.2 ADIMENSIONALIZAÇÃO

No capítulo 2, escrevemos nosso funcional energia livre (2.29) em uma versão discreta, na seção anterior, obtivemos uma forma contínua da parte energética de nosso modelo. A parte entrópica é dada pela expressão (2.19) e vamos tratá-la numericamente no capítulo 4 para cada estrutura modulada, portanto, o objetivo desta seção é obter uma forma adimensional deste funcional energia livre. Desta forma, substituímos a parte energética de (2.29) por (3.22) para escrever nosso funcional energia livre em sua forma contínua

$$\begin{aligned} F[\mathbf{m}(\mathbf{r})] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{r} \left[ \frac{J}{2} (\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 + \frac{D}{a} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r})) \right. \\ \left. - \frac{1}{a^2} \mathbf{h} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}) - \frac{2J}{a^2} |\mathbf{m}(\mathbf{r})|^2 + \frac{b}{a^2} |\mathbf{m}_z(\mathbf{r})|^2 - \frac{T}{a^2} S[\mathbf{m}(\mathbf{r})] \right]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Procuramos agora encontrar uma expressão adimensional para o funcional (3.23), de tal forma que seja possível descrevê-lo através do menor número de parâmetros livres.

Esta transformação torna-se extremamente útil no estudo numérico do sistema, dado que precisamos definir valores para estes parâmetros. Deste modo, almejamos construir uma expressão da forma

$$\tilde{F} = \tilde{\mathcal{H}} - \tilde{T}\tilde{S}, \quad (3.24)$$

onde o símbolo *til* indica variáveis e expressões adimensionais. Como procedimento padrão, escolhemos uma escala de densidade de energia característica para o sistema, baseando-se na razão entre a escala de energia da interação de troca ferromagnética e da interação de Dzyaloshinskii-Moriya indicada por

$$E_0 = \frac{D^2}{2Ja^2} \left[ 1 + \frac{4J^2}{D^2} \right], \quad (3.25)$$

que possui dimensões de  $[Energia/(Comprimento)^2]$ . Esta é uma escala de densidade de energia característica para este tipo de sistema, já que nos permite identificar o regime em que estamos trabalhando através da razão entre o acoplamento simétrico e o acoplamento anti-simétrico. No capítulo 4, vamos desenvolver e descrever as fases presentes no sistema, onde será necessário caracterizar espacialmente a magnetização através de funções periódicas (modulações). Sendo assim, uma forma apropriada para descrever uma modulação é dada pela expressão

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) \sim \sum_i \mathbf{c}_i \cos(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i), \quad (3.26)$$

no qual as constantes  $\mathbf{c}_i$  representam os modos de expansão da solução proposta e  $\mathbf{k}_i$  é o vetor de onda conjugado a  $\mathbf{r}_i$  no espaço recíproco. Para nos ajudar a completar a adimensionalização do funcional (3.23), é necessário definir o vetor de onda característico das modulações. Com a finalidade de alcançar este objetivo, definimos aqui uma solução padrão de modo único da fase helicoidal [73, 97] por

$$\mathbf{m}(\mathbf{r})_{hel} = c_1 \cos(kx)\hat{\mathbf{z}} - c_1 \sin(kx)\hat{\mathbf{y}}. \quad (3.27)$$

que será discutida com detalhes em uma seção do capítulo 4. Para calcular o vetor de onda característico, inserimos a modulação (3.27) em nosso funcional (3.23) a campo nulo e tomamos a derivada em relação a  $k$  para obter

$$k_{min} = \frac{D}{Ja}. \quad (3.28)$$

Desta forma, observamos que dimensionalmente,  $k_{min} \sim [Comprimento]^{-1}$  e portanto, definimos as seguintes quantidades adimensionais

$$\tilde{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k_{min}} ; \tilde{\mathbf{r}} = k_{min}\mathbf{r}, \quad (3.29)$$

o que nos permite reescrever uma solução modulada de forma adimensional

$$\tilde{\mathbf{m}}(\tilde{\mathbf{r}}) \sim \sum_i \mathbf{c}_i \cos(\tilde{\mathbf{k}}_i \cdot \tilde{\mathbf{r}}_i). \quad (3.30)$$

Tomando então a razão  $\mathcal{H}/E_0$  para o termo de troca ferromagnética  $\mathcal{H}_{ex}$  temos

$$\frac{\mathcal{H}_{ex}}{E_0} = \frac{a^2 J^2}{D^2} \left[ 1 + \frac{4J^2}{D^2} \right]^{-1} = k_{min}^{-2} \left[ 1 + \frac{4J^2}{D^2} \right]^{-1}, \quad (3.31)$$

para o termo de Dzyaloshinskii-Moriya encontramos

$$\frac{\mathcal{H}_{DM}}{E_0} = \frac{2aJ}{D} \left[ 1 + \frac{4J^2}{D^2} \right]^{-1} = 2k_{min}^{-1} \left[ 1 + \frac{4J^2}{D^2} \right]^{-1}, \quad (3.32)$$

no termo que carrega uma parte da expansão da interação de troca, observamos que

$$\frac{\mathcal{H}_{exp}}{E_0} = \frac{-4J^2}{D^2} \left[ 1 + \frac{4J^2}{D^2} \right]^{-1}. \quad (3.33)$$

Na interação com o campo externo e para a anisotropia, definimos imediatamente as seguintes variáveis adimensionais

$$\tilde{\mathbf{h}} = \frac{\mathbf{h}}{a^2 E_0}; \quad \tilde{b} = \frac{b}{a^2 E_0}, \quad (3.34)$$

que representam parâmetros ligados ao campo magnético externo e o peso energético da anisotropia do sistema respectivamente. Observamos ainda, que a seguinte quantidade se destaca naturalmente nos diferentes termos da nossa energia livre

$$\alpha = \left[ 1 + \frac{4J^2}{D^2} \right]^{-1}, \quad (3.35)$$

que é de fato adimensional, definindo o parâmetro livre de interesse deste sistema. Analisamos agora os limites para o qual este parâmetro é válido. Observe que seu valor depende exclusivamente da razão entre o peso da interação de troca ferromagnética e do peso da interação de Dzyaloshinskii-Moriya, desta forma, no limite em que  $J/D \gg 1$ , ou seja, no regime em que a interação de troca ferromagnética se torna extremamente forte em relação a interação  $DM$ , o parâmetro  $\alpha$  assume o valor nulo. Quando estamos no regime em que a interação  $DM$  é muito mais intensa que a interação de troca, temos que  $J/D \ll 1$  e portanto, o parâmetro  $\alpha$  possui o valor um. Escrevemos então,

$$0 \leq \alpha \leq 1, \quad (3.36)$$

que será nossa referência para identificarmos o regime em que estamos trabalhando durante este estudo. Lembramos ainda que, para o gradiente e o rotacional, precisamos transformar as suas derivadas,

$$\frac{d}{d\mathbf{r}} = k_{min} \frac{d}{d\tilde{\mathbf{r}}}. \quad (3.37)$$

Por fim, de maneira semelhante a escala de energia do sistema, definimos uma escala característica de temperaturas, onde utilizamos novamente os parâmetros  $J$  e  $D$  para escrever

$$k_B T_0 = \frac{D^2}{3J} \left[ 1 + \frac{4J^2}{D^2} \right]. \quad (3.38)$$

Esta escala de temperatura é escolhida de tal forma que a temperatura crítica do sistema com anisotropia nula ( $b = 0$ ) seja  $T_c = 1$ . Em seguida, definimos a seguinte variável adimensional  $\tilde{T} = T/T_0$ , de tal forma que juntamente com a escala de energia, obtemos

$$\frac{k_B T}{a^2 E_0} = \frac{k_B T_0 \tilde{T}}{a^2 E_0} = \frac{2}{3} \tilde{T}. \quad (3.39)$$

Tendo definido as escalas de energia e temperatura de interesse neste sistema, rescrevemos o funcional energia em sua forma adimensional completa

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}}[\tilde{\mathbf{m}}(\tilde{\mathbf{r}})] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2 \tilde{\mathbf{r}} \left[ \alpha \left( \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{m}}(\tilde{\mathbf{r}}) \right)^2 + 2\alpha \tilde{\mathbf{m}}(\tilde{\mathbf{r}}) \cdot \left( \tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{m}}(\tilde{\mathbf{r}}) \right) \right. \\ \left. - \tilde{\mathbf{h}} \cdot \tilde{\mathbf{m}}(\tilde{\mathbf{r}}) - (1 - \alpha) |\tilde{\mathbf{m}}(\tilde{\mathbf{r}})|^2 + \tilde{b} |\tilde{\mathbf{m}}_z(\tilde{\mathbf{r}})|^2 + \frac{2}{3} \tilde{T} \tilde{S}[\tilde{\mathbf{m}}(\tilde{\mathbf{r}})] \right], \quad (3.40) \end{aligned}$$

onde redefinimos a energia livre adimensional por  $\tilde{\mathcal{F}} = F k_{min}^2 / E_0$ . Desta maneira, estamos prontos para trabalhar com as fases presentes no modelo e encontrar a organização das mesmas a partir de seu diagrama de fases. É importante notar que a partir deste ponto em nosso trabalho, utilizaremos variáveis adimensionais sem carregar a notação com símbolos excessivos.

## 4 FASES E MODULAÇÕES

Possuindo o funcional energia livre em sua forma adimensional, podemos agora analisar as fases presentes em nosso sistema. O objetivo inicial deste capítulo é propor soluções moduladas que correspondem as diferentes fases do sistema e inseri-las na expressão (3.40). Com as soluções moduladas e suas respectivas energias livres bem definidas, realizamos a minimização para valores de interesse dos parâmetros do sistema. Ao analisarmos a energia livre minimizada de cada solução, podemos comparar os seus valores a cada ponto em um espaço de parâmetros de interesse, e desta forma, construir nosso diagrama de fases.

Para a consideração das fases presentes, encontramos na literatura que a competição entre a interação de troca magnética e a interação de Dzyaloshinskii-Moriya resulta em texturas magnéticas [33,34,37,38] não triviais, que conhecemos como a fase helicoidal e a fase de *skyrmions*. Como estamos considerando a ação de um campo magnético externo, sabemos que existem campos de saturação, onde todos os spins se alinham com o campo magnético para minimizar a energia livre do sistema, conhecida como a fase magnética homogênea. Por fim, o *ansatz* da solução homogênea pode ser menos restritivo em campos magnéticos menores, permitindo que os spins tenham projeções no plano, resultado em uma fase magnética inclinada (*canted*).

Após a construção da energia livre de cada fase do sistema, abordamos brevemente as considerações numéricas para a determinação do diagrama de fases. Em seguida, discutimos e analisamos os resultados obtidos, através das propriedades e informações qualitativas fornecidas pelo diagrama de fases de nosso sistema.

### 4.1 FASE HOMOGÊNEA

A fase homogênea ocorre em geral para campos magnéticos expressivos, onde os spins tendem a se alinhar com o campo magnético externo. Este alinhamento promove uma configuração homogênea, ordenando todos os spins em uma mesma direção. Escolhemos alinhar o campo magnético externo de maneira perpendicular ao plano do sistema e portanto, definimos

$$\mathbf{h} = (0, 0, h) = h\hat{\mathbf{z}}, \quad (4.1)$$

que será a escolha utilizada ao longo deste trabalho. Sabemos que na fase homogênea, todos os spins estão alinhados com o campo magnético e parece natural descrever a magnetização a partir de uma constante na direção do campo externo, tendo em vista que a solução é homogênea e não varia espacialmente. Deste modo, escrevemos a magnetização local da solução homogênea por

$$\mathbf{m}_{hom} = (0, 0, c_0) = c_0\hat{\mathbf{z}}. \quad (4.2)$$

Em posse da solução que descreve a fase homogênea, podemos utilizar a expressão (3.40) e construir sua energia livre. É importante notar aqui, que como não há variação espacial para a solução homogênea, parte do termo oriundo da interação de troca ferromagnética e a interação de Dzyaloshinskii-Moriya são trivialmente zeros, restando apenas a expressão

$$\tilde{\mathcal{F}}[\mathbf{m}(\mathbf{r})] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{r} \left[ -\mathbf{h} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}) - (1 - \alpha)|\mathbf{m}(\mathbf{r})|^2 + b|\mathbf{m}_z(\mathbf{r})|^2 + \frac{2T}{3}S[\mathbf{m}(\mathbf{r})] \right]. \quad (4.3)$$

Para os três primeiros termos da expressão, inserimos a solução da magnetização homogênea (4.2) para obter

$$\tilde{\mathcal{F}}_{hom} = \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{r} \left[ -hc_0 + (\alpha - 1 + b)c_0^2 \right] + \frac{2T}{3} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{r} S[\mathbf{m}_{hom}]. \quad (4.4)$$

Embora a energia livre do sistema seja infinita, o seu valor em unidade de área é finito. Esta é a quantidade que procuramos para identificar qual fase é termodinamicamente relevante em cada ponto do espaço de parâmetros em nosso modelo. Deste modo, escrevemos

$$\frac{\tilde{\mathcal{F}}_{hom}}{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\mathbf{r}}{A} \left[ -hc_0 + (\alpha - 1 + b)c_0^2 \right] + \frac{2T}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\mathbf{r}}{A} S[\mathbf{m}_{hom}], \quad (4.5)$$

sendo  $A$  o equivalente a área do sistema, já adimensional neste caso, e redefinimos a energia livre  $\tilde{\mathcal{F}}_{hom}/A \rightarrow \tilde{\mathcal{F}}_{hom}$  pela sua densidade. Como a magnetização local desta solução é constante e a entropia é um funcional do módulo da magnetização dado por (2.28), integramos para obter

$$\tilde{\mathcal{F}}_{hom} = -hc_0 + (\alpha - 1 + b)c_0^2 + \frac{2T}{3}S[c_0], \quad (4.6)$$

que é a expressão desejada para a densidade de energia livre da fase homogênea. Note que, possuímos apenas  $c_0$  como parâmetro variacional a ser minimizado neste caso. Seguiremos o mesmo procedimento para encontrar uma expressão equivalente para as outras fases do sistema.

## 4.2 FASE INCLINADA

A fase inclinada é em essência uma fase homogênea, porém aqui, permitimos ao *ansatz* da nossa solução uma liberdade maior. Como estamos tratando com spins de Heisenberg, admitimos a possibilidade destes estarem inclinados em relação ao plano como solução de mínima energia livre no sistema, possuindo assim uma magnetização descrita espacialmente por uma componente paralela ao campo externo, bem como uma projeção no plano da amostra. Propomos portanto, uma solução espacial para a magnetização local da seguinte forma

$$\mathbf{m}_{can} = (c_1, 0, c_0) = c_1\hat{\mathbf{x}} + c_0\hat{\mathbf{z}}, \quad (4.7)$$

onde  $c_1$  representa a componente da magnetização ao longo do plano do sistema. Da mesma forma que na seção anterior, a partir da expressão (3.40), utilizamos o *ansatz* proposto para a solução homogênea inclinada no cálculo de sua energia livre. Notamos novamente, que nossa solução não varia espacialmente, o que indica que parte do termo de interação de troca ferromagnética e a interação de Dzyaloshinskii-Moriya são de fato nulos, como esperaríamos de uma solução homogênea. Escrevemos portanto, a sua densidade de energia livre por

$$\tilde{\mathcal{F}}_{can} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\mathbf{r}}{A} \left[ -hc_0 + (\alpha - 1)(c_0^2 + c_1^2) + bc_0^2 \right] + \frac{2T}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\mathbf{r}}{A} S[\mathbf{m}_{can}]. \quad (4.8)$$

Novamente aqui, a magnetização local é constante e portanto, integramos (4.8) para obter a densidade de energia livre da fase inclinada

$$\tilde{\mathcal{F}}_{can} = -hc_0 + (\alpha - 1)(c_0^2 + c_1^2) + bc_0^2 + \frac{2T}{3} S[\sqrt{c_0^2 + c_1^2}]. \quad (4.9)$$

Neste caso, os parâmetros variacionais são descritos por  $c_0$  e  $c_1$ , que competem entre si para minimizar a energia livre desta fase. Observe que, no limite em que o campo magnético externo é muito alto, a amplitude projetada no plano  $c_1$  tende a zero, enquanto  $c_0$  alinhado com o campo externo, atinge seu valor máximo, recuperando assim, o resultado da fase homogênea em (4.6) como esperávamos do comportamento deste regime.

### 4.3 FASE HELICOIDAL

Nesta seção do texto, iremos trabalhar para encontrar a solução da terceira fase disponível no modelo, a fase helicoidal. O vetor magnetização local desta fase descreve uma hélice quando nos movemos em uma dada direção no plano da amostra, enquanto que em uma direção perpendicular a esta, a magnetização é homogênea, como pode ser observado na figura 3. Propomos portanto, uma solução modulada [73,97] do tipo

$$\mathbf{m}(\mathbf{r})_{hel} = \sum_{j=0}^n \left( c_j \cos(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n}_1 + d_j \sin(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n}_2 \right), \quad (4.10)$$

onde utilizamos aqui os resultados obtidos no capítulo anterior para de fato adimensionalizar o argumento das funções periódicas. A soma é realizada sobre o número  $n$  de modos de Fourier, conhecidos também como harmônicos da expansão. Como a solução helicoidal possui um sentido preferencial de rotação na formação de sua hélice, precisamos definir com cuidado os vetores que compõe (4.10). Para garantir isto, sabemos da literatura [73,97] que  $\mathbf{n}_1$ ,  $\mathbf{n}_2$  e  $\mathbf{k}_j$  devem ser perpendiculares entre si, onde  $\mathbf{n}_1$  e  $\mathbf{n}_2$  são vetores unitários. Deste modo, definimos a direção e o sentido do vetor  $\mathbf{n}_1$  da seguinte maneira

$$\mathbf{n}_1 = (0, 0, 1) = \hat{\mathbf{z}}. \quad (4.11)$$

Na fase helicoidal, o vetor  $\mathbf{k}_j = j\mathbf{k}$  é descrito pela sua multiplicidade na direção preferencial de movimento. Escolhemos portanto um vetor  $\mathbf{k}$  perpendicular a  $\mathbf{n}_1$ ,

$$\mathbf{k} = k_0(1, 0, 0) = k_0\hat{\mathbf{x}}. \quad (4.12)$$

Por fim,  $\mathbf{n}_2$  é escolhido como um vetor unitário perpendicular a  $\mathbf{n}_1$  e  $\mathbf{k}$  simultaneamente,

$$\mathbf{n}_2 = \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{n}_1}{|\mathbf{k} \times \mathbf{n}_1|} = (0, -1, 0) = -\hat{\mathbf{y}}. \quad (4.13)$$

Com a definição dos vetores que fazem parte do nosso *ansatz*, escrevemos a solução helicoidal do nosso modelo

$$\mathbf{m}(\mathbf{r})_{hel} = \sum_{j=0}^n \left( c_j \cos(jk_0x)\hat{\mathbf{z}} - d_j \sin(jk_0x)\hat{\mathbf{y}} \right). \quad (4.14)$$

É importante notar aqui, que propomos uma solução menos restritiva em relação a

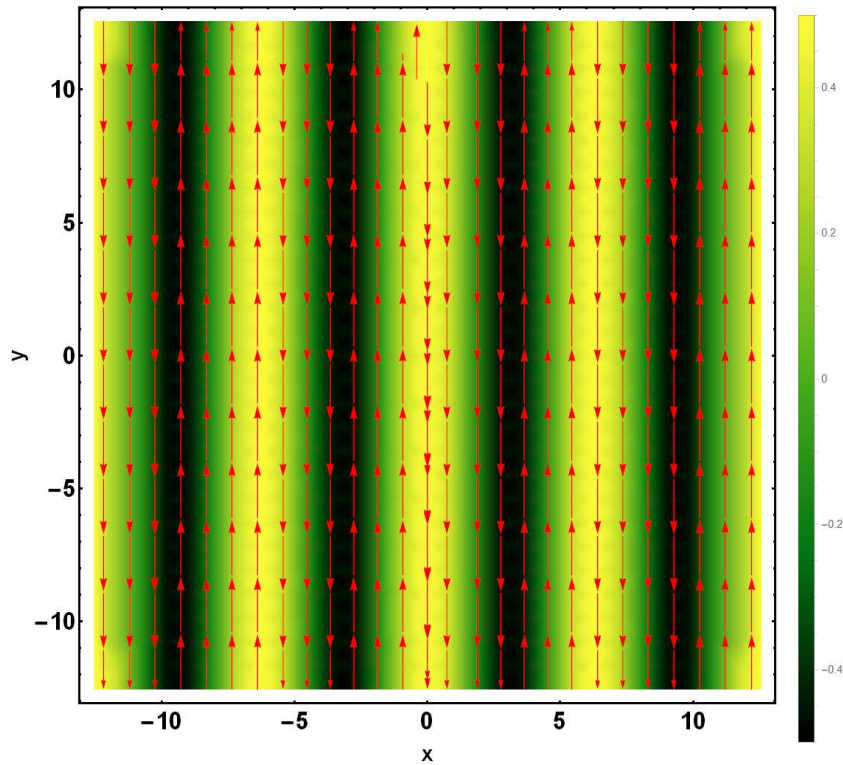


Figura 14 – Gráfico de densidade da magnetização em  $\hat{\mathbf{z}}$  (mapa de cores) bem como o fluxo da magnetização no plano em aproximação de modo único ( $n=1$ ) com  $c_0 = 0$ ,  $c_1 = d_1 = 0.5$  e  $k_0 = 1$ .

encontrada normalmente na literatura [73, 97]. Permitimos amplitudes distintas para as diferentes direções da expansão, onde ainda na minimização de nossa energia livre, temos a possibilidade de recuperar o caso em que  $c_j = d_j$ , se esta configuração for a de menor energia. Para verificar que esta solução possui o comportamento helicoidal, fazemos um gráfico do vetor magnetização local, que mostra em uma escala de cores a componente



na direção  $\hat{z}$  superposto as linhas de campo de magnetização ao longo do plano  $\mathbf{xy}$ . O resultado pode ser observado na figura 14, onde o fluxo no plano é periódico como esperávamos, possuindo spins de sentidos opostos separados por paredes de domínio. A figura refere-se a uma aproximação de modo único para a modulação ( $n = 1$ ), mas serve como referência qualitativa para garantir a coesão da solução proposta em (4.14).

Partindo agora de nosso funcional adimensional (3.40), vamos calcular as contribuições das interações utilizando a solução modulada (4.14). Como nossa solução varia espacialmente, os termos que antes eram nulos agora contribuem para a energia livre. Porém, ao inserirmos a solução modulada no funcional, notamos a presença de termos oscilatórios e constantes em nossas integrais. Como estamos no limite termodinâmico, os termos oscilatórios na energia livre são subdominantes frente às contribuições que crescem linearmente com o tamanho do sistema. Desta forma, as contribuições oscilatórias não são relevantes neste limite e portanto, encontramos para a densidade de energia livre da fase helicoidal a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}}_{hel} = & -hc_0 + (\alpha - 1)c_0^2 + b \left( c_0^2 + \sum_{j=1}^n \frac{c_j^2}{2} \right) + -2\alpha k_0 \sum_{j=1}^n j c_j d_j \\ & + \sum_{j=1}^n \left( \alpha(jk_0 - 1)^2 - 1 \right) \left( \frac{c_j^2}{2} + \frac{d_j^2}{2} \right) + \frac{2T}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\mathbf{r}}{A} S[\mathbf{m}(\mathbf{r})_{hel}]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Como nesta fase a magnetização local varia espacialmente, vamos resolver a integral envolvendo a entropia através do método de quadraturas de Gauss-Legendre. A expressão obtida precisa ainda ser minimizada usando como parâmetros variacionais  $c_j$ ,  $d_j$  e  $k_0$ . Através desta minimização, será possível encontrar o perfil de equilíbrio da solução dentro da aproximação de campo médio variacional, assim como de sua energia livre.

## 4.4 FASE DE SKYRMIONS

Chegamos enfim à última configuração que iremos considerar em nosso modelo. Utilizamos o mesmo tipo de solução (4.10) para a fase de *skyrmions*, mas de maneira distinta da fase helicoidal, a solução de *skyrmions* é construída a partir de três vetores de onda  $\mathbf{k}$  no plano  $\mathbf{xy}$  que possuem um ângulo de  $2\pi/3$  entre si [23]. Um conjunto simples que descreve esta construção é dado por

$$\mathbf{k}_1 = k_0(1, 0); \quad \mathbf{k}_2 = k_0 \left( -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right); \quad \mathbf{k}_3 = k_0 \left( -\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (4.16)$$

com  $k_0$  representando o módulo de seu vetor  $\mathbf{k}_i$  associado. O conjunto em (4.16) é suficiente para uma descrição de modo único, porém, estamos interessados em generalizar nossa solução em amplitudes de Fourier, como fizemos na fase helicoidal. Para acomodar nossa

solução generalizada, escrevemos os vetores de onda como

$$\mathbf{k}_{lm} = k_0 \left( l \mathbf{e}_1 + m \mathbf{e}_2 \right), \quad (4.17)$$

onde  $l$  e  $m$  são números inteiros e definimos os vetores

$$\mathbf{e}_1 = (1, 0); \quad \mathbf{e}_2 = \left( -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right). \quad (4.18)$$

Observe que, agora não somente as direções principais são relevantes, mas suas combinações lineares devem ser levadas em consideração para a construção correta da solução. Descrevemos portanto, a solução em  $n$  modos para a textura de *skyrmions*,

$$\mathbf{m}(\mathbf{r})_{sky} = \sum_{l,m=0}^n \left( c_{lm} \cos(\mathbf{k}_{lm} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n}_{lm1} + d_{lm} \sin(\mathbf{k}_{lm} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n}_{lm2} \right), \quad (4.19)$$

onde para cada amplitude da expansão harmônica, definimos um conjunto  $\{\mathbf{k}_{lm}, \mathbf{n}_{lm1}, \mathbf{n}_{lm2}\}$  de vetores perpendiculares entre si, de modo que o produto

$$\mathbf{k}_{lm} \cdot (\mathbf{n}_{lm1} \times \mathbf{n}_{lm2}), \quad (4.20)$$

deve manter o mesmo sinal e preservar a quiralidade da solução.

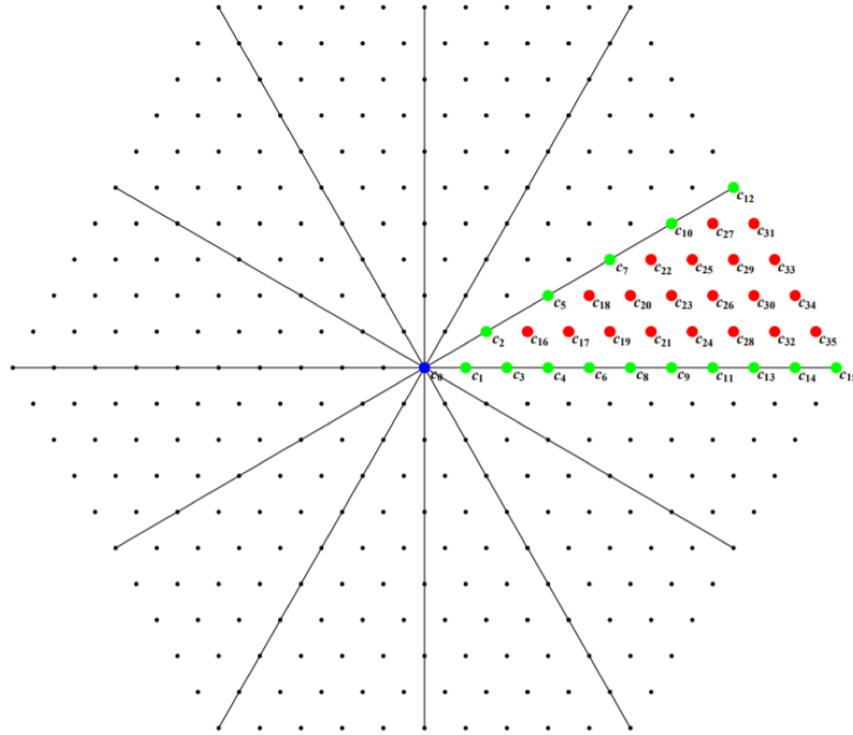


Figura 15 – Padrão triangular demonstrando as diferentes possibilidades de combinações dos vetores de onda para um número de modos com  $n = 10$  [15], onde consideramos o caso em que  $c_{lm} = d_{lm}$ . Aqui a contagem de harmônicos relevantes é realizada da esquerda para a direita (partindo de  $c_0$ ) em ordem de surgimento.

A combinação de vetores de onda da expressão (4.17) define uma rede triangular dada pela figura 15, onde usamos uma expansão harmônica em  $n = 10$  e consideramos o caso em que  $c_{lm} = d_{lm}$ , para a análise que faremos a seguir. Como podemos observar, a solução completa deve respeitar as simetrias de uma rede triangular, desta forma, nem todos os modos da expansão harmônica são totalmente independentes. O padrão triangular revela três distintos grupos através da degenerescência de seus modos harmônicos. O primeiro grupo é descrito pelo modo de Fourier trivial  $c_0$  (ponto azul na figura 15), localizado no centro do padrão triangular e possui degenerescência um. O segundo grupo é descrito por modos que estão em direções preferenciais (pontos verdes na figura 15) com  $\theta = 0$  e  $\theta = \pi/6$ , que através da simetria do padrão triangular, apresenta degenerescência seis. Enquanto, por fim, o último grupo de modos (pontos vermelhos na figura 15) na expansão harmônica é descrito pelos vetores de onda em  $\theta \in (0, \pi/6)$  que por argumentos de simetria, possuem degenerescência doze.

Para a escolha de dez modos harmônicos ( $n_{max} = 10$ ), um total de  $n = 331$  modos compreendem todas as possibilidades de vetores de onda no padrão triangular. Após nossas considerações de simetria, identificamos que o número de modos independentes necessários para a construção da solução é reduzido para  $n = 35$  modos. Esta análise se torna importante para a minimização de nossa solução (4.19), já que possuímos o dobro de harmônicos ( $c_{lm} \neq d_{lm}$ ) em nossa consideração. De maneira semelhante a construção da solução helicoidal, definimos o vetor  $\mathbf{n}_{lm1}$  na direção  $\hat{\mathbf{z}}$ , enquanto o vetor  $\mathbf{n}_{lm2}$  é descrito pelo produto vetorial

$$\mathbf{n}_{lm2} = \frac{\mathbf{k}_{lm} \times \mathbf{n}_{lm1}}{|\mathbf{k}_{lm} \times \mathbf{n}_{lm1}|}, \quad (4.21)$$

que agora possui uma direção específica para cada vetor de onda considerado na construção da solução de *skyrmions*. Para testar nossa solução, construímos um gráfico de densidades semelhante ao da fase helicoidal para confirmar o comportamento da textura magnética de *skyrmions*. O resultado está exposto na figura 16.

Como sabemos construir a combinação dos vetores de onda para a solução de *skyrmions*, basta realizarmos a contagem correta de modos independentes com as suas degenerescências e implementar a solução em (3.40). Usamos um argumento similar ao da fase helicoidal em relação às funções oscilatórias na integração para obter o seguinte funcional densidade de energia livre

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}}_{sky} = & -hc_0 + (\alpha - 1)c_0^2 + b \left( c_0^2 + \sum_{l,m}^n \frac{c_{lm}^2}{2} \right) - 6\alpha \sum_{l,m}^n c_{lm} d_{lm} |\mathbf{k}_{lm}| \\ & + 3 \sum_{l,m}^n \left( \alpha (|\mathbf{k}_{lm}| - 1)^2 - 1 \right) \left( \frac{c_{lm}^2}{2} + \frac{d_{lm}^2}{2} \right) + \frac{2T}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\mathbf{r}}{A} S[\mathbf{m}(\mathbf{r})_{sky}], \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde será necessário utilizar o método de quadraturas de Gauss-Legendre para resolver a integral relacionada à entropia desta fase. Novamente, a expressão (4.22) precisa ser

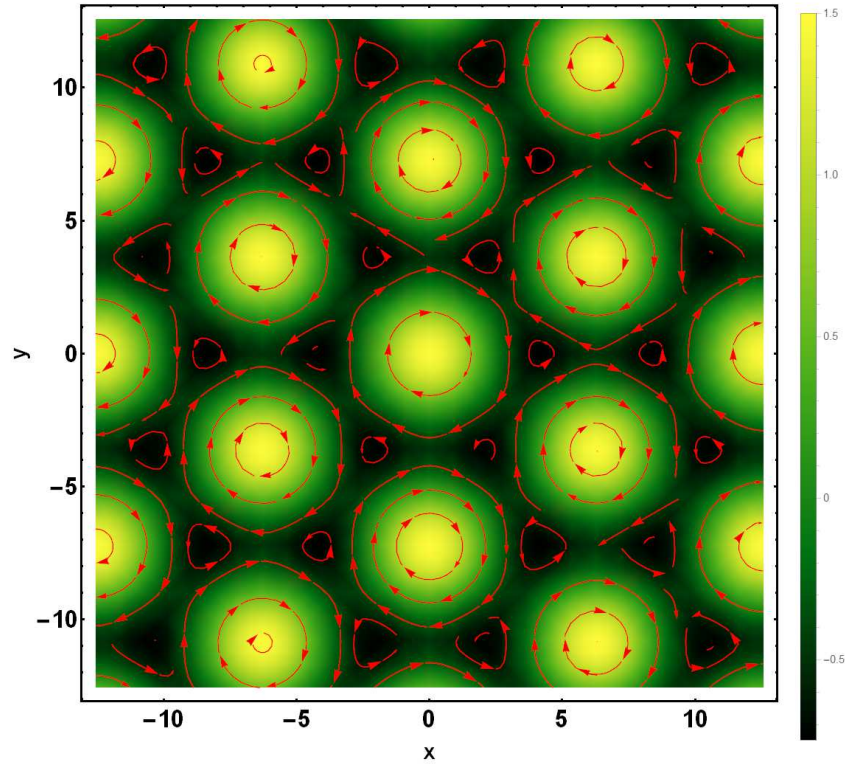


Figura 16 – Gráfico de densidade da magnetização para a solução de *skyrmions* em  $\hat{z}$  (mapa de cores) bem como o fluxo da magnetização no plano em aproximação de modo único com  $c_0 = 0$ ,  $c_1 = d_1 = 0.5$  e  $k = 1$ .

minimizada em relação a seus parâmetros variacionais para que seja possível encontrar o perfil de equilíbrio da energia livre associada a esta fase. Em posse do funcional que descreve todas as fases presentes em nosso modelo, voltamos a nossa atenção ao cálculo da temperatura crítica, fundamental na determinação do diagrama de fases.

## 4.5 TEMPERATURA CRÍTICA

Dedicamos nesta seção um espaço para o cálculo da temperatura crítica de nosso sistema. Para encontrar a temperatura, devemos analisar o comportamento dos coeficientes dominantes das soluções moduladas, desta forma, escolhemos trabalhar com a solução helicoidal em aproximação de modo único. Em relação a entropia, faremos uma aproximação até quarta ordem de sua expansão, isto será suficiente para encontrar o comportamento crítico que desejamos. Inserimos a solução (4.14) na aproximação de modo único em nosso funcional energia (3.40) para observarmos o seu comportamento em relação aos termos dominantes a campo nulo

$$\tilde{\mathcal{F}}_{hel} \sim \left[ (\alpha - 1) + b + \alpha k_0^2 + T \right] \frac{c_1^2}{2} - 2\alpha k_0 c_1 d_1 + \left[ (\alpha - 1) + \alpha k_0^2 + T \right] \frac{d_1^2}{2}, \quad (4.23)$$

de onde escrevemos uma matriz a partir dos coeficientes  $c_1$  e  $d_1$ ,

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} \frac{(a-1)}{2} + \frac{b}{2} + \frac{\alpha k_0^2}{2} + \frac{T}{2} & -\alpha k_0 \\ -\alpha k_0 & \frac{(a-1)}{2} + \frac{\alpha k_0^2}{2} + \frac{T}{2} \end{bmatrix}. \quad (4.24)$$

Como estamos interessados na instabilidade do sistema, procuramos o momento em que pelo menos um destes autovalores se torna negativo, identificando o ponto em que a solução homogênea trivial de  $c_1 = d_1 = 0$  deixa de ser um mínimo local. Deste modo, analisamos o comportamento do menor autovalor associado a matriz

$$\lambda_- = \frac{1}{4} \left[ -2 + 2\alpha + b + 2\alpha k_0^2 - \sqrt{b^2 + 16\alpha^2 k_0^2 + 2T} \right]. \quad (4.25)$$

Em seguida, observamos que o autovalor depende de  $k_0$ , um parâmetro variacional. Sendo assim, tomamos a derivada de (4.25) em relação a  $k_0$  para encontrar seu valor mínimo,

$$k_0 = \frac{\sqrt{16\alpha^2 - b^2}}{4\alpha}. \quad (4.26)$$

Substituímos (4.26) em (4.25) e analisamos o comportamento limite em que  $\lambda_- = 0$  para estudar a instabilidade e encontrar a temperatura crítica de nosso modelo

$$T_c = 1 - \frac{b(8\alpha - b)}{16\alpha}. \quad (4.27)$$

A temperatura crítica do sistema depende não somente do nosso parâmetro livre  $\alpha$ , mas também de sua anisotropia  $b$ . Com todas as ferramentas preparadas, analisamos o modelo a partir de uma perspectiva numérica na próxima seção.

## 4.6 CONSIDERAÇÕES NUMÉRICAS

Dedicamos esta seção do texto para discutir sobre as considerações numéricas de nosso trabalho, começando pela entropia do sistema. Como vimos na seção sobre campo médio variacional, podemos escrever a entropia (2.28) a partir da magnetização local do sistema. Sabemos ainda, que para o nosso modelo, o módulo da magnetização está compreendido em  $|\mathbf{m}| \in [0, 1]$ , de tal forma que criamos uma lista dos valores da entropia baseados neste intervalo. Em posse do par ordenado formado por valores da magnetização e entropia, interpolamos esta lista para criar uma expressão para o funcional da entropia em relação à magnetização local do sistema. Desta forma, na densidade de energia livre da fase homogênea (4.6) e inclinada (4.9), basta substituímos o módulo de sua respectiva magnetização local dentro desta expressão para encontrarmos a entropia. Para a fase helicoidal (4.15) e a fase de *skyrmions* (4.22), escrevemos a entropia a partir de uma soma discreta usando o método de Gauss-Legendre.

O código que minimiza numericamente a densidade de energia livre correspondente a cada fase em nosso sistema foi construído com a ajuda do software *Mathematica*. O

programa desenvolvido usa como parâmetros de entrada os valores correspondentes ao acoplamento do modelo  $\alpha$ , o campo magnético  $h$ , a temperatura  $T$  e a anisotropia  $b$ . Após o processo de minimização, identificamos a solução com a menor densidade de energia livre entre os diferentes *ansatz*. Como exemplo do processo de construção do diagrama de fases, fixamos os valores de anisotropia e do parâmetro livre  $\alpha$  e usamos como referência as variáveis em campo e temperatura. Fornecemos valores específicos para  $T$  e  $h$  que formam um par ordenado e o ponto de interesse a ser estudado. Com todos os parâmetros definidos, utilizamos a função que construímos no *Mathematica* para minimizar os funcionais referentes às distintas fases, que nos revela a configuração preferível pelo sistema dadas as condições dos parâmetros fornecidos.

Para otimizar a construção do diagrama, analisamos apenas a linha crítica que separa as configurações possíveis do sistema, para isso, fornecemos um ponto inicial no eixo das abscissas  $T_0$  bem como um ponto inicial para o eixo das ordenadas  $h_0$ , formando um par ordenado no diagrama, cuja característica particular é de estar a uma iteração de atravessar a linha crítica e passar de uma fase para outra. Este ponto é encontrado manualmente em uma primeira análise do diagrama de fases. É possível esboçar um diagrama deste modo de maneira vertical, tomando iterações no valor de  $h$ , ou então horizontalmente, tomando iterações para os valores de  $T$ . Em nosso caso, escolhemos iterações verticais, o que significa que o par ordenado inicial  $(T_0, h_0)$  está em uma das fases do modelo, e ao adicionarmos uma iteração ao par ordenado  $(T_0, h_0 + \Delta h)$ , atravessamos a linha crítica e nos encontramos em uma fase distinta da anterior como podemos observar na figura 17.

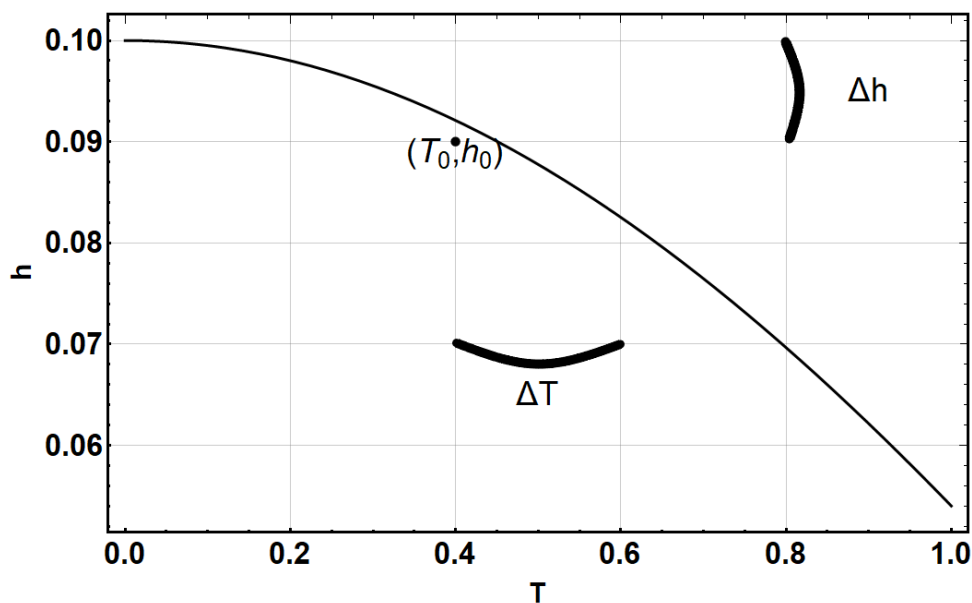


Figura 17 – Exemplo qualitativo de como os pontos são escolhidos juntamente com a iteração a ser realizada. Quanto maior for a resolução escolhida para desenhar o diagrama, melhor será o resultado da linha crítica.

Ao atravessar a linha crítica, marcamos o ponto imediatamente antes da transição

para construir a linha no diagrama de fases. Após encontrar um ponto que pertence a linha crítica, realizamos uma iteração agora no eixo das abscissas para  $\Delta T$  e utilizamos o mesmo procedimento para encontrar o próximo ponto da linha crítica efetuando iterações para  $\Delta h$ . Observe que, ao encontrar o ponto inicial da linha crítica, os outros pontos são descobertos realizando as iterações necessárias de uma maneira mais direta, adicionando ou subtraindo  $\Delta h$  do ponto de interesse. Para realizar a minimização do funcional, precisamos fornecer pontos iniciais para todas as variáveis a serem minimizadas, desta forma, ajudamos ainda o tempo de construção do diagrama guardando e utilizando o mínimo encontrado para os pontos anteriores da linha crítica, tornando a minimização do funcional mais efetiva.

## 4.7 DIAGRAMA DE FASES

Com os detalhes técnicos discutidos, devemos nos preocupar agora com o número de modos harmônicos a serem usados em nossa expansão. Torna-se importante encontrar um equilíbrio entre o número mínimo de modos harmônicos que descrevem qualitativamente o sistema, sem que isso comprometa o tempo de processamento do nosso código. Para realizar este teste, escolhemos esboçar um diagrama de fases de campo magnético por temperatura ( $h \times T$ ), onde escolhemos a anisotropia com um valor nulo  $b = 0$  e o parâmetro livre  $\alpha = 0.2$ . Comparamos para este diagrama a linha crítica gerada por  $n = 5$  (círculos vermelhos na figura 18) e  $n = 10$  (quadrados azuis na figura 18). A resolução do diagrama é dada por  $\Delta h = 0.0001$  para o eixo das ordenadas, enquanto que para as abscissas utilizamos  $\Delta T = 0.001$ . Observamos imediatamente que não há nenhuma diferença qualitativa entre os diagramas. Apesar da solução de  $n = 10$  possuir mais modos, o que significa obter um melhor resultado para a minimização das energias, a média de diferença entre os pontos (campo crítico  $h_c$ ) da linha crítica que separa a fase homogênea da fase de *skyrmions* é dada por 0.20% enquanto que para a linha crítica que separa a fase de *skyrmions* e a fase helicoidal a diferença média é dada por apenas 0.07%.

Para a solução de cinco modos, a fase de *skyrmions* possui um total de 23 modos relevantes, enquanto na expansão de dez modos, saltamos para 73 modos relevantes. Este aumento significativo no número de modos é diretamente refletido no tempo de minimização das soluções. Enquanto que a minimização de um ponto no diagrama em  $n = 5$  leva em média 40 segundos, a minimização de  $n = 10$  demora em média 2700 segundos, o que em princípio não justifica a escolha de uma expansão com  $n > 5$ . Para confirmar as nossas suspeitas, construímos um gráfico da energia em função do número de modos, bem como o campo crítico em função do número de modos que está exposto na figura 19. Observamos que a partir da solução de três modos, tanto a energia quanto o campo crítico assumem um valor bem próximo daquele de uma expansão com modos superiores. Como era de se esperar, a solução de modo único não é suficiente para caracterizar de maneira correta a expansão. Desta forma, devido à falta de efeitos qualitativos e pequena

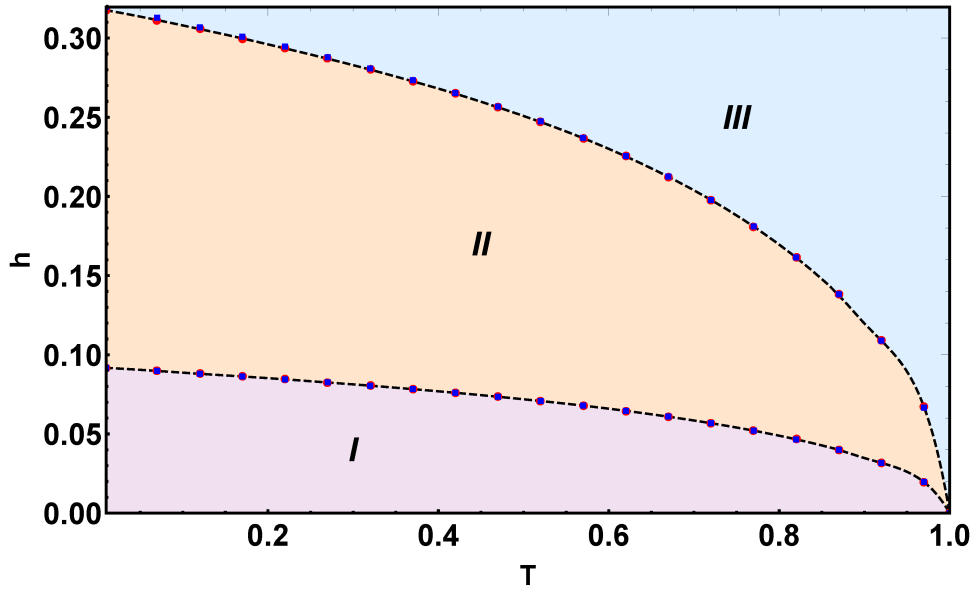


Figura 18 – Diagrama de fases teste para  $b = 0$  e  $\alpha = 0.2$  onde a região **I** representa a fase helicoidal, **II** a fase de *skyrmions* e **III** a fase homogênea. Os pontos vermelhos (círculos) no diagrama representam a linha crítica gerada pela expansão de cinco modos de Fourier ( $n = 5$ ) enquanto que os pontos azuis (quadrados) representam a expansão para dez modos ( $n = 10$ ).

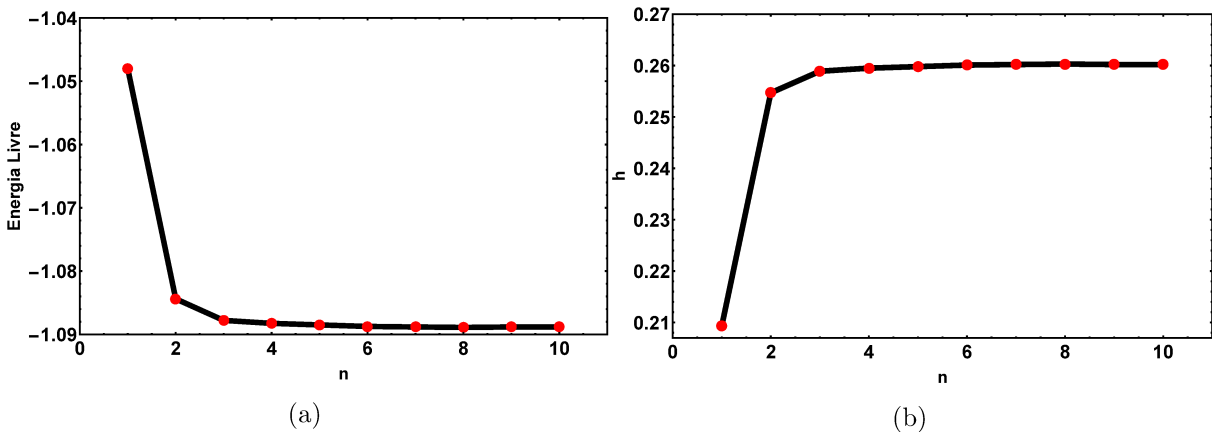


Figura 19 – Dados da linha crítica entre a fase homogênea e a fase de *skyrmions* (a) energia livre em relação ao número de modos (b) campo crítico em relação ao número de modos.

diferença entre os campos críticos das soluções (menos que 1%), escolhemos construir os diagramas trabalhando com a expansão em cinco harmônicos. Este mesmo comportamento foi verificado para outros valores do parâmetro livre  $\alpha$  em nossa análise.

#### 4.7.1 Estado Fundamental

Estudamos agora as propriedades do estado fundamental em nosso sistema, para isso, fixamos a temperatura em  $T = 0.01$  e construímos o diagrama de fases analisando campo magnético  $h$  e anisotropia  $b$ . Utilizamos uma resolução de  $\Delta h = 0.0001$  para o eixo das ordenadas e  $\Delta b = 0.1$  no eixo das abscissas. A figura 20 mostra os resultados obtidos



para três valores do parâmetro  $\alpha$ , que correspondem a regimes distintos da razão  $J/D$ , verificado na equação (3.35).

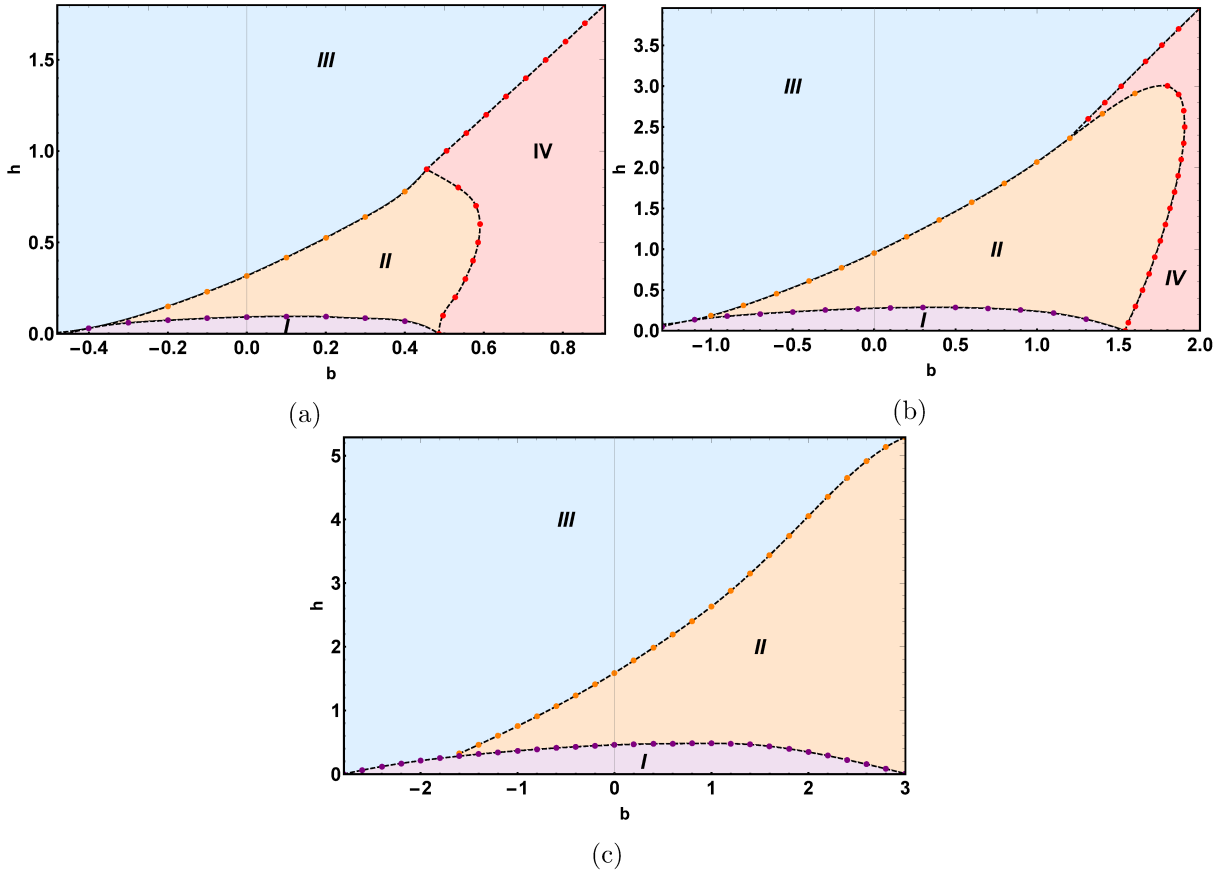


Figura 20 – Diagrama de fases para  $T = 0.01$  com parâmetro livre (a)  $\alpha = 0.2$ , (b)  $\alpha = 0.6$  e (c)  $\alpha = 1.0$ . A região **I** representa a fase helicoidal, **II** a fase de *skyrmions*, **III** a fase homogênea e por fim, **IV** a fase inclinada.

Olhando para a estabilidade das fases em nosso sistema, notamos no diagrama de  $\alpha = 0.2$  (figura 20a) que o efeito da anisotropia *easy-axis*, representado pela região  $b < 0$ , penaliza as fases moduladas e favorece o alinhamento ferromagnético do sistema com o campo magnético externo. À medida em que entramos na região de anisotropia *easy-plane* onde  $b > 0$ , observamos que a fase de *skyrmions* existe em valores maiores de campo magnético, demonstrando uma estabilidade maior da textura como descrito na literatura [34, 38]. É interessante notar que enquanto a fase helicoidal e de *skyrmions* existem em um sistema com anisotropia *easy-axis*, a configuração magnética de spins inclinados possui um limiar anisotrópico, aparecendo no diagrama a partir de  $b > 0.5$ , dominando a região de baixos campos magnéticos no sistema. Note ainda que em  $b = 0.5$  estamos na fase inclinada a campo nulo, conforme aumentamos o campo magnético para este valor de anisotropia, temos uma transição sequencial das fases inclinada-*skyrmions*-inclinada-homogênea. Como em essência a fase inclinada é uma configuração homogênea, esperamos encontrar algum tipo de reentrância no diagrama de temperatura para este valor de anisotropia, tornando este um ponto de interesse a ser estudado no futuro.

Continuamos o estudo dos diagramas de anisotropia, onde aumentamos o valor do parâmetro  $\alpha = 0.6$  (figura 20b) e esperamos encontrar uma região de estabilidade maior da fase de *skyrmions* dado a relação (3.35). Neste diagrama, observamos o mesmo comportamento qualitativo do diagrama de  $\alpha = 0.2$ , onde a anisotropia *easy-axis* favorece o ordenamento ferromagnético enquanto a anisotropia *easy-plane* beneficia as fases moduladas. Novamente, existe um limiar anisotrópico para a existência da fase inclinada, porém, em um valor maior da anisotropia *easy-plane*, onde o mesmo comportamento reentrante é observado. Como esperávamos, a fase de *skyrmions* se torna mais estável com o aumento do valor do parâmetro  $\alpha$ .

Para encerrar a análise dos diagramas de anisotropia, construímos um diagrama com o parâmetro  $\alpha = 1.0$  (figura 20c), onde presenciemos um comportamento qualitativo distinto dos outros diagramas, em que a fase inclinada desaparece completamente. Este comportamento é facilmente explicado analisando o funcional de energia livre (4.9) para a fase inclinada. À medida que nos aproximamos do valor de  $\alpha = 1.0$ , o termo que diferencia a fase inclinada da fase homogênea se torna irrelevante no funcional e terminamos com a mesma configuração ferromagnética para o sistema; esta circunstância nos leva a obter um diagrama de fases que possui apenas a fase homogênea e as fases moduladas do sistema.

#### 4.7.2 Temperatura Finita

Tendo examinado os diagramas de anisotropia em nosso sistema, podemos agora analisar os diagramas de temperatura escolhendo valores de interesse de anisotropia para serem estudados. Para ter uma caracterização completa do sistema, vamos escolher para um mesmo parâmetro  $\alpha$  três valores distintos de anisotropia. Estamos interessados em examinar o comportamento do diagrama para uma anisotropia *easy-axis* ( $b < 0$ ), uma anisotropia *easy-plane* ( $b > 0$ ) e no terceiro caso, para anisotropia nula ( $b = 0$ ). Como observamos nos diagramas de anisotropia (figura 20), as fases moduladas deixam de existir em valores muito negativos de  $b$ . Desta forma, para obter resultados coerentes para análise, escolhemos  $b = -0.3$  para representar a anisotropia *easy-axis* e  $b = 0.3$  para caracterizar o comportamento *easy-plane*. Escolhemos  $\alpha = 0.2$ , utilizamos a resolução de  $\Delta h = 0.0001$  para o eixo das ordenadas e  $\Delta T = 0.001$  no eixo das abscissas para construir os diagramas que estão na figura 21.

O primeiro fato a ser observado nestes diagramas é a existência da fase de *skyrmions* na região de baixas temperaturas do sistema. Comportamento observado em resultados experimentais e simulações para filmes finos [3, 5], distinto do comportamento observado em três dimensões [23, 27]. A estabilidade da fase de *skyrmions* em três dimensões é dada por flutuações térmicas em um pequeno regime do diagrama de fases (figura 5), onde observamos no trabalho de Kanazawa *et al* [26] que a diminuição da espessura da amostra favorece a formação de *skyrmions* no sistema. Outro aspecto interessante do diagrama é dado pelo crescimento da fase de *skyrmions* com o aumento da anisotropia *easy-plane*, que

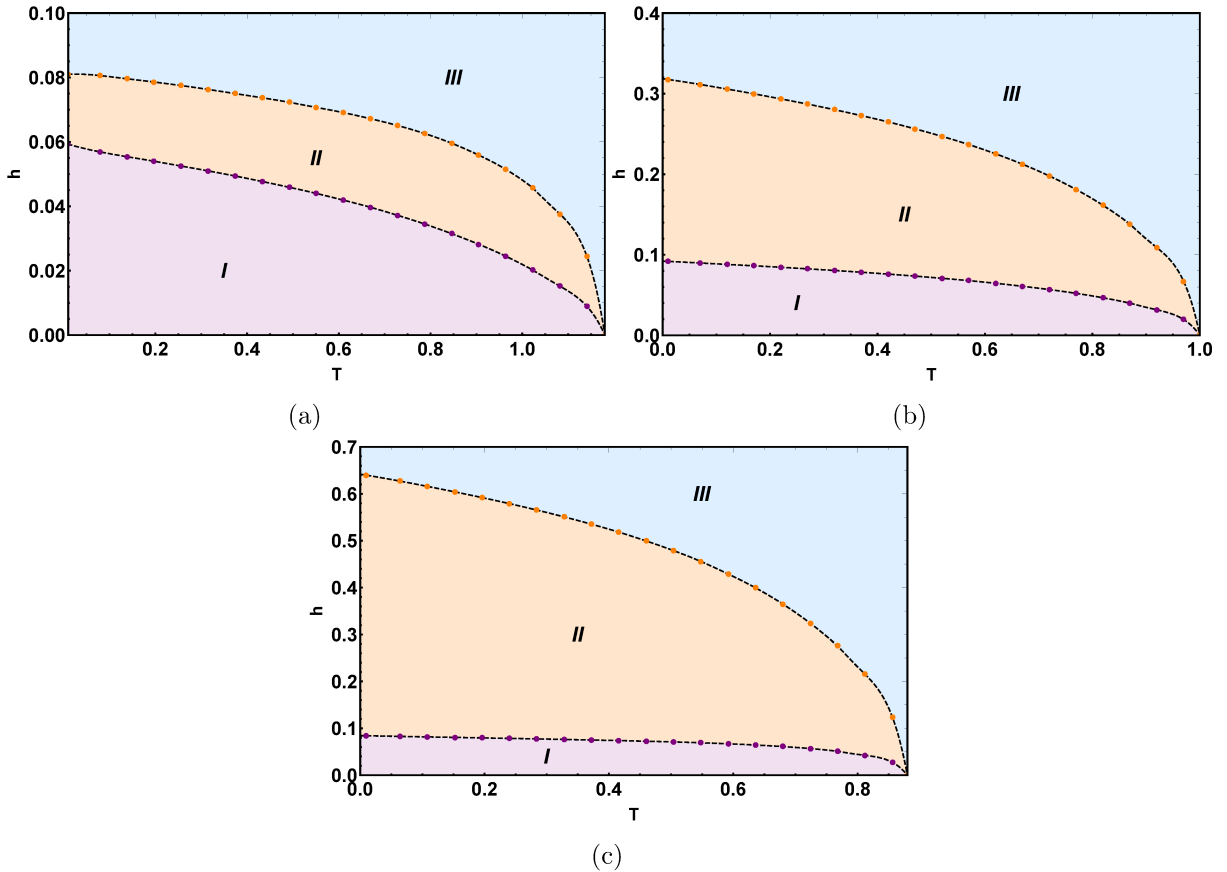


Figura 21 – Diagrama de fases para o parâmetro  $\alpha = 0.2$  com anisotropia (a)  $b = -0.3$ , (b)  $b = 0$  e (c)  $b = 0.3$ . A região **I** representa a fase helicoidal, **II** a fase de *skyrmions* e **III** a fase homogênea.

pode ser observado sequencialmente na figura 21. Podemos construir outros diagramas, agora variando o nosso parâmetro livre  $\alpha$ . Encontramos porém, que os diagramas mantêm a mesma forma qualitativa, alterando apenas os campos críticos onde ocorrem as transições.

Para finalizar este capítulo, voltamos para a figura 20a e analisamos o ponto para o qual a anisotropia assume o valor de  $b = 0.55$ . Como havíamos destacado anteriormente, dado o comportamento do diagrama de anisotropia neste ponto, esperamos encontrar algum tipo de reentrância no diagrama de fases de temperatura. O diagrama está exposto na figura 22a. Confirmamos que as nossas suspeitas estavam corretas, de modo que obtemos uma reentrância para o diagrama de temperatura nessa região de anisotropia. Como a configuração inclinada do sistema é em essência uma fase homogênea, a reentrância é dada pela transição sequencial inclinada-*skyrmions*-inclinada movendo-se ao longo do parâmetro  $h$  para uma determinada região de baixas temperaturas. Outro detalhe interessante neste diagrama, é dado pelo fato de que não há estabilidade para a textura helicoidal neste valor de anisotropia. O mesmo comportamento reentrante é observado na figura 20b, agora em um valor distinto de anisotropia ( $b = 1.5$ ).

Ao aumentarmos um pouco mais a anisotropia para o diagrama da figura 20a, entramos em uma região onde não existe uma configuração de *skyrmions* no estado

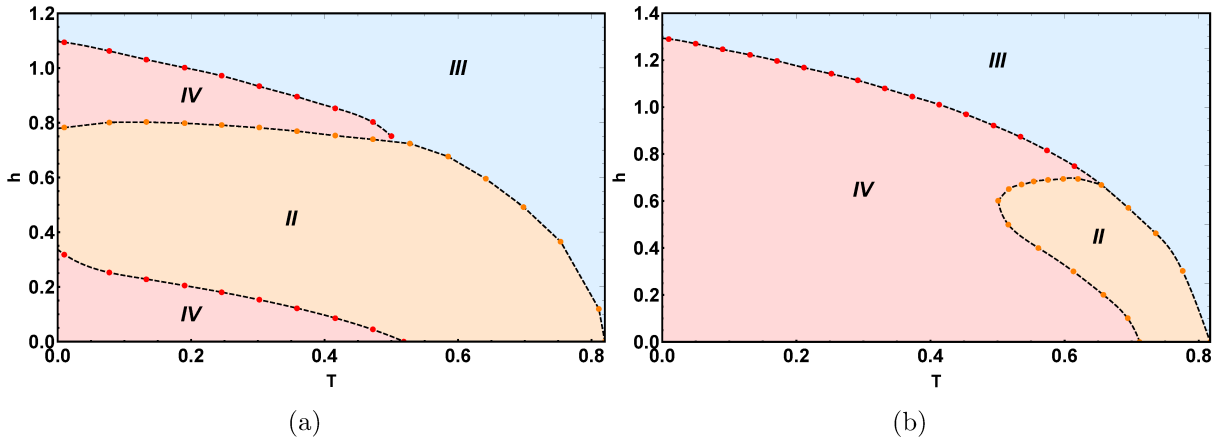


Figura 22 – Diagrama de fases reentrante em  $\alpha = 0.2$  para (a)  $b = 0.55$  e (b)  $b = 0.65$ . A região **II** representa a fase de *skyrmions*, **III** a fase homogênea e **IV** a fase inclinada.

fundamental. Esperamos portanto, que a fase de *skyrmions* se torne instável a baixas temperaturas à medida que aumentamos nossa anisotropia. Construímos portanto, um diagrama em  $\alpha = 0.2$  e  $b = 0.65$  para confirmar este comportamento (figura 22b).

Como esperávamos, não existe fase de *skyrmions* para a região de baixas temperaturas do sistema, por outro lado, ela se torna estável a temperaturas mais altas. Desta forma, o aumento da anisotropia no sistema para um parâmetro livre  $\alpha < 1$  diminui a estabilidade da fase de *skyrmions* em um diagrama de campo por temperatura. Para a região de temperaturas que possibilita a existência da fase de *skyrmions*, encontramos novamente um comportamento reentrante quando nos movemos verticalmente variando o campo magnético a uma temperatura constante no diagrama. Um comportamento semelhante é notado para o diagrama da figura 20b.

Como apontado no início deste capítulo, a informação obtida através dos diagramas de campo médio é de fato qualitativa. Estes diagramas descrevem apenas como a estrutura local do nosso sistema está distribuída ao longo do espaço de parâmetros de interesse, e não fornecem nenhuma informação sobre sua ordem posicional ou orientacional. Outro aspecto importante desta discussão se deve à ausência de flutuações térmicas em nossa descrição de campo médio. Como sabemos, estas flutuações assumem um papel fundamental em sistemas bidimensionais [88, 89], onde tanto a ordem posicional quanto a orientacional podem ser facilmente destruídas a partir de sua consideração. A falta da descrição de quebra de simetrias na análise de campo médio se torna o principal incentivo da discussão do capítulo 5, onde procuramos considerar flutuações e incluir defeitos topológicos, incorporando elementos da teoria *KTHNY* aos resultados que encontramos neste capítulo. Isto nos permitirá extrair mais informações acerca destes diagramas, agora não apenas sobre suas estruturas locais, mas também sobre suas propriedades de longo alcance.

## 5 FASES TOPOLÓGICAS

O capítulo final deste trabalho tem como objetivo caracterizar topologicamente a textura helicoidal e de *skyrmions* estudadas no capítulo 4, através da teoria *KTHNY* para o derretimento de sistemas em duas dimensões. Vamos estudar o efeito da inclusão de flutuações em nossas soluções moduladas, e construir um hamiltoniano elástico efetivo que descreva o seu comportamento. Em seguida, vamos evidenciar como estes hamiltonianos elásticos possuem formas compatíveis com aquelas discutidas no capítulo 2, para uma fase de faixas e para um cristal triangular em duas dimensões, validando a discussão realizada anteriormente. Após este mapeamento, vamos discutir como a partir da determinação das propriedades elásticas microscópicas de nossas fases (helicoidal e *skyrmions*), podemos utilizar os resultados do grupo de renormalização mencionados no capítulo 2 para identificar as transições de fases topológicas. Por fim, vamos corrigir o diagrama de fases de campo médio que construímos no capítulo 4, incluindo a descrição das fases topológicas nas diferentes estruturas moduladas no espaço de parâmetros de interesse.

### 5.1 ESTUDO TOPOLÓGICO DA FASE HELICOIDAL

Através de considerações da teoria *KTHNY* em uma textura do tipo faixas, sabemos que os defeitos topológicos representam flutuações relevantes e desempenham um papel importante na descrição do seu derretimento [92, 93]. Do seu estudo, reconhecemos a existência de uma fase em baixas temperaturas caracterizada por uma ordem posicional de curto alcance e uma ordem orientacional de quase longo alcance, que chamamos de fase sólida de faixas. Ao aquecermos o nosso sistema, esta fase sólida eventualmente sofre uma transição para uma fase onde ordem posicional e orientacional existem apenas localmente, que podemos entender como uma fase líquida de faixas. Para estudar este ordenamento da estrutura modulada, partimos da energia livre adimensional (3.40) e escrevemos a função partição do sistema

$$\mathcal{Z} = \int D\mathbf{m} e^{-\beta\mathcal{F}[\mathbf{m}]}, \quad (5.1)$$

onde calcular a função partição implica em considerar todas as configurações possíveis de nosso parâmetro de ordem local  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ . Em um regime de baixas temperaturas, esperamos que as flutuações relevantes para o sistema se encontrem em uma região próxima da configuração  $\mathbf{m}(\mathbf{r})$  que minimiza a energia, o que nos permite tratar estas deformações perturbativamente. Estes defeitos podem ser incluídos através de um campo contínuo de deformação na própria solução modulada de nossa estrutura. O custo energético que este tipo de flutuação carrega nos leva a encontrar um hamiltoniano elástico efetivo em nossa estrutura, seja ela uma textura do tipo faixas ou bolhas, como veremos na próxima seção.

Para estudar a estrutura topológica, começamos por perturbar a solução modulada para a textura helicoidal. Faremos isso utilizando um campo de deformação arbitrário  $u(\mathbf{x})$ , de tal forma que a solução não perturbada (4.10) se torna

$$\mathbf{m}(\mathbf{r})_{hel} = \sum_{j=0}^n \left( c_j \cos \left( j(k_0 x + k_0 u(\mathbf{x})) \right) \mathbf{n}_1 - d_j \sin \left( j(k_0 x + k_0 u(\mathbf{x})) \right) \mathbf{n}_2 \right). \quad (5.2)$$

Note que, ao tomarmos nosso campo perturbativo  $u(\mathbf{x}) \rightarrow 0$ , recuperamos o comportamento da solução modulada em (4.10), como era de se esperar em um sistema que não possui flutuações. Estamos interessados em estudar as propriedades elásticas do sistema devido ao campo de deformação, portanto, partimos do funcional energia livre descrito em (3.40), e inserimos a solução modulada perturbada (5.2) para estudar o seu efeito em nossa energia livre. A partir desta análise, percebemos que apenas os termos provenientes do hamiltoniano são de interesse para a consideração das flutuações em nosso sistema. Desta forma, definimos um hamiltoniano elástico efetivo  $\Delta\mathcal{H}_{el} = \mathcal{H}_{pert} - \mathcal{H}_0$ , sendo  $\mathcal{H}_{pert}$  descrito pela solução modulada perturbada. Para encontrar uma expressão para o hamiltoniano elástico, lembramos ainda que o campo de deformação é uma perturbação no sistema e portanto,  $k_0 u(\mathbf{x}) \ll 1$ . Desta forma, expandimos (5.2) até segunda ordem nas flutuações devido às possíveis combinações de interesse que descrevem a deformação.

É importante observar que o vetor de onda local  $\mathbf{k}$  pode ser escrito através de uma expansão do argumento das modulações, e portanto, assume a forma

$$\mathbf{k}(\mathbf{x}) = \nabla\psi = \mathbf{k} + k_0 \nabla u(\mathbf{x}), \quad (5.3)$$

onde a fase da modulação é definida por  $\psi = \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + u(\mathbf{x}))$ . Lembramos ainda, que para manter a quiralidade correta da solução, definimos o vetor  $\mathbf{n}_2$  em termos de  $\mathbf{n}_1$  e do nosso vetor de onda local  $\mathbf{k}$ . Isto implica que o vetor unitário também deve ser corrigido pelo campo de deformação resultando em

$$\mathbf{n}_2(\mathbf{x}) = \frac{(\mathbf{k} + k_0 \nabla u(\mathbf{x})) \times \hat{\mathbf{z}}}{|(\mathbf{k} + k_0 \nabla u(\mathbf{x})) \times \hat{\mathbf{z}}|}, \quad (5.4)$$

esta escolha de  $\mathbf{n}_2(\mathbf{x})$  garante a manutenção da quiralidade da modulação deformada. Ao realizar esta expansão, encontramos o hamiltoniano que descreve o comportamento elástico da solução helicoidal

$$\Delta\mathcal{H}_{el} = \frac{1}{2} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[ Bk_x^2 + B\lambda^2 k_y^4 \right] \hat{u}(\mathbf{k}) \hat{u}(-\mathbf{k}), \quad (5.5)$$

que possui a mesma forma que o hamiltoniano efetivo (2.33), encontrado para um sistema de faixas em duas dimensões no capítulo 2. Este hamiltoniano elástico da fase helicoidal é compatível com resultados encontrados por Radzihovsky *et al* [98]. Identificamos portanto, os coeficientes elásticos de interesse em nosso hamiltoniano

$$B = \alpha \sum_{j=0}^n (j c_j k_0)^2; \quad B\lambda^2 = \alpha \sum_{j=1}^n d_j^2. \quad (5.6)$$

É interessante notar aqui que os coeficientes elásticos dependem do hamiltoniano original através do nosso parâmetro livre  $\alpha$ , bem como de seus parâmetros variacionais, utilizados na minimização do funcional energia livre. Com os coeficientes elásticos obtidos na expansão da textura helicoidal (5.6), podemos nos concentrar agora em resolver as equações de fluxo de renormalização. A energia  $E_d$  associada à rigidez orientacional (2.35) para uma fase de faixas em nosso caso é dada [99] por  $E_d = \pi B \lambda^{1/2} / k_0^{3/2}$ . Escrevemos a partir de (2.36) as equações diferenciais de fluxo para a rigidez  $K$  e a fugacidade  $y$

$$\begin{aligned} dK(l)/dl &= -4\pi K(l)y^2(l); \\ dy(l)/dl &= (2 - \pi K(l))y(l), \end{aligned} \quad (5.7)$$

onde as condições iniciais são definidas por

$$y(0) = e^{-E_c/k_B T}; K(0) = \frac{K_o}{k_B T}, \quad (5.8)$$

sendo  $E_c$  a energia associada aos vórtices no modelo  $XY$ . A energia  $E_c$  necessária para definir a condição inicial da fugacidade pode ser calculada empregando uma técnica similar a Pokrovsky *et al* [99], pelo qual estimamos a energia em

$$E_c = K\pi(\gamma - \text{cosintegral}(\pi) + \ln \pi), \quad (5.9)$$

onde  $\gamma$  é a constante de Euler-Mascheroni definida por  $\gamma \simeq 0,577216$ . Com as condições iniciais definidas, encontramos numericamente a solução da equação diferencial para a rigidez renormalizada em  $K(+\infty)$ . A fase desordenada dentro da região helicoidal pode ser observada através de pontos onde a rigidez do sistema é nula, permitindo assim, identificar a configuração sólida dentro da nossa textura magnética helicoidal. Em seguida, realizamos um estudo perturbativo semelhante para a textura de *skyrmions*.

## 5.2 ESTUDO TOPOLÓGICO DA FASE DE SKYRMIONS

Pela teoria *KTHNY* [51–53], esperamos que o derretimento de uma rede triangular bidimensional passe por uma transição intermediária conhecida como hexática. Esta configuração, distinta de um sólido e um líquido, possui ordem posicional de curto alcance e ordem orientacional de quase longo alcance. No caso de uma textura magnética de *skyrmions*, vamos demonstrar um comportamento similar ao de uma rede triangular frente à consideração de pequenas flutuações no sistema. Este resultado sugere que o processo de derretimento térmico da estrutura de *skyrmions* pode ter características semelhantes as observadas em redes triangulares bidimensionais.

A partir da característica vetorial da solução de *skyrmions* (4.19), consideramos um campo de deformações descrito por  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  em nossa solução perturbada

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(\mathbf{r})_{sky} = & \sum_{l,m}^n \left( c_{lm} \cos \left( \mathbf{k}_{lm} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y})) \right) \mathbf{n}_{lm1} \right. \\ & \left. + d_{lm} \sin \left( \mathbf{k}_{lm} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y})) \right) \mathbf{n}_{lm2} \right). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Assim como na solução helicoidal, podemos descrever o vetor de onda local a partir da fase de nossa modulação. Como consequência, o vetor unitário  $\mathbf{n}_{lm2}$  também é perturbado, e agora assume a forma

$$\mathbf{n}_{lm2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{(\mathbf{k}_{lm} + k_{lmx} \nabla u_x(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + k_{lmy} \nabla u_y(\mathbf{x}, \mathbf{y})) \times \hat{\mathbf{z}}}{|(\mathbf{k}_{lm} + k_{lmx} \nabla u_x(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + k_{lmy} \nabla u_x(\mathbf{x}, \mathbf{y})) \times \hat{\mathbf{z}}|}, \quad (5.11)$$

mantendo a quiralidade (4.20) correta para a solução de *skyrmions* perturbada. Podemos então inserir (5.10) em (3.40) e expandir até segunda ordem nossa solução para encontrar o seguinte hamiltoniano elástico para a textura de *skyrmions*

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{el} = & \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[ (2\mu + \lambda) k_x^2 + \mu k_y^2 \right] \hat{u}_x(\mathbf{k}) \hat{u}_x(-\mathbf{k}) + \\ & \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[ \mu k_x^2 + (2\mu + \lambda) k_y^2 \right] \hat{u}_y(\mathbf{k}) \hat{u}_y(-\mathbf{k}) + \\ & \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} (2\mu + 2\lambda) k_x k_y \hat{u}_x(\mathbf{k}) \hat{u}_y(-\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (5.12)$$

onde reconhecemos o mesmo padrão descrito em (2.38). Este hamiltoniano efetivo (5.12) que descreve as propriedades elásticas do cristal de *skyrmions* coincide com aquele de uma rede triangular em duas dimensões, de tal forma que os resultados da teoria *KTHNY* podem ser aplicados no estudo topológico desta fase. Destacamos então a partir de (5.12) os coeficientes de Lamé por

$$\mu = \left( \frac{3\alpha}{8} \sum_{l,m}^n |\mathbf{k}_{lm}|^2 (c_{lm}^2 + d_{lm}^2) \right) = \lambda. \quad (5.13)$$

Começamos por estudar como identificar a transição entre a fase sólida e a fase hexática em nosso diagrama. Através das considerações feitas no capítulo 2, encontramos o seguinte par de equações diferenciais de fluxo (2.41), que descrevem o comportamento da rigidez  $K$  e da fugacidade  $y$  do sistema em sua fase sólida

$$\begin{aligned} \frac{dK(l)}{dl} = & -K^2(l) \left[ \frac{3\pi}{2} y^2(l) I_0 \left( \frac{K(l)}{8\pi} \right) e^{K/8\pi} - \frac{3\pi}{4} y^2(l) I_1 \left( \frac{K(l)}{8\pi} \right) e^{K/8\pi} \right] \\ \frac{dy(l)}{dl} = & \left( 2 - \frac{K(l)}{8\pi} y(l) \right) + 2\pi y^2(l) I_0 \left( \frac{K(l)}{16\pi} \right) e^{K/8\pi}, \end{aligned} \quad (5.14)$$



onde  $I_{0,1}$  representa a função de Bessel modificada e definimos as seguintes condições iniciais

$$K(0) = \frac{K_D}{k_B T}; \quad y(0) = e^{-E_D/k_B T}, \quad (5.15)$$

para resolver as equações diferenciais em (5.14). A energia do defeito  $E_D$  pode ser estimada através de uma técnica empregada por Pokrovsky *et al* [99], que consiste em transformar o hamiltoniano efetivo (2.39) para o espaço recíproco e encontrar a configuração dos vetores de Burger que minimizam a energia de interação. Seleccionando um *cut-off* apropriado no espaço de momentos, estimamos a energia em

$$E_D = \frac{K_D}{8\pi} \left( \gamma - \text{cosintegral}(\pi) + \ln \pi \right), \quad (5.16)$$

onde  $\gamma$  representa novamente a constante de Euler-Mascheroni e a constante elástica  $K_D$  é calculada [91, 95] por

$$K_D = \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda} \left( \frac{4\pi}{\sqrt{3}k_0} \right)^2. \quad (5.17)$$

Podemos agora resolver numericamente as equações diferenciais em (5.14) e determinar o comportamento da rigidez renormalizada  $K(+\infty)$ . A análise do seu comportamento frente ao aumento da temperatura no sistema nos permitirá identificar a transição da fase sólida de *skyrmions* para a fase hexática.

Enquanto o sistema continua o seu derretimento térmico, ele eventualmente atinge uma fase líquida. Este processo é caracterizado pela transição de uma fase hexática, de ordem orientacional de quase longo alcance e ordem posicional de curto alcance, para um líquido com ordem posicional e orientacional de curto alcance. Como destacamos no capítulo 2, a fase hexática preserva a ordem orientacional e podemos descrevê-la através de um hamiltoniano efetivo [91, 95] do tipo  $XY$  na aproximação de longos comprimentos de onda

$$\mathcal{H}_{ef} = \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{r} K_A (\nabla\theta(\mathbf{r}))^2, \quad (5.18)$$

onde a constante de Franck  $K_A$  é calculada [90, 95] por

$$K_A = 2E_D \left( \frac{2\xi_D}{a_l} \right)^2, \quad (5.19)$$

sendo  $a_l$  o *cut-off* de curtas distâncias do sistema e  $\xi_D$  o comprimento de correlação. Como bem estabelecido pelo grupo de renormalização, este comprimento de correlação pode ser calculado através da seguinte expressão

$$\xi_D = \exp\{l^*\}, \quad (5.20)$$

onde  $l^*$  é conhecido como o comprimento de escala do sistema para que tanto a rigidez  $K(l)$  quanto a fugacidade  $y(l)$ , atinjam um comportamento estacionário ( $K(\infty)$  e  $y(\infty)$ ). A determinação de  $l^*$  está associada a solução e análise do grupo de equações diferenciais em (5.14). As equações diferenciais de fluxo para a rigidez  $K$  e a fugacidade  $y$  associadas a transição hexática-líquida são descritas [91, 95] por

$$\begin{aligned} dK(l)/dl &= -4\pi K(l)y^2(l); \\ dy(l)/dl &= (2 - \pi K(l))y(l), \end{aligned} \quad (5.21)$$

com condições iniciais

$$K(0) = \frac{K_A}{k_B T}; y(0) = e^{-E_A/k_B T}, \quad (5.22)$$

onde a energia  $E_A$  agora é calculada [99] por  $E_A = K_A(\gamma - \text{cosintegral}(\pi) + \ln \pi)/8\pi$ . Para identificar a transição da fase hexática para a fase líquida, resolvemos numericamente as equações de fluxo (5.21) em  $K(+\infty)$  e analisamos a resposta da rigidez em relação ao aumento da temperatura no sistema. A fase líquida será representada pelos pontos que possuem rigidez nula em nosso diagrama de fases.

Possuímos agora todas as ferramentas necessárias para identificar as regiões correspondentes às diferentes fases topológicas em nossos diagramas. Para construir os diagramas, minimizamos o funcional energia livre correspondente à solução helicoidal e de *skyrmions* e encontramos de fato seus coeficientes elásticos. A partir disto, podemos usar o procedimento descrito acima para identificar cada configuração topológica na região de interesse.

### 5.3 DIAGRAMAS TOPOLÓGICOS

Aplicamos o procedimento descrito na seção anterior e encontramos as fases topológicas nos diagramas da figura 21. O resultado pode ser observado na figura 23. Nos diagramas, destacamos as regiões de interesse, **I**: a) fase helicoidal sólida b) fase helicoidal líquida, **II**: a) fase sólida de *skyrmions* b) fase hexática de *skyrmions* c) fase líquida de *skyrmions*, **III** a fase homogênea. Escolhemos aplicar a mesma cor para a região homogênea e as outras duas fases líquidas, o motivo se deve à simetria semelhante apresentada por estas configurações.

Ao analisarmos os diagramas variando a anisotropia para um mesmo parâmetro  $\alpha$ , percebemos que há pouca mudança para o limite entre as regiões. No entanto, é interessante observar que a região de *skyrmions* do diagrama é dominada pela fase de *skyrmions* líquidos. Esperávamos encontrar curvas mais acentuadas separando as regiões topológicas do diagrama, o fato das mesmas serem retas inclinadas é atribuída ao caráter perturbativo do esquema de cálculo desenvolvido, que não permite um tratamento completamente consistente das técnicas de campo médio variacional e do grupo de renormalização.

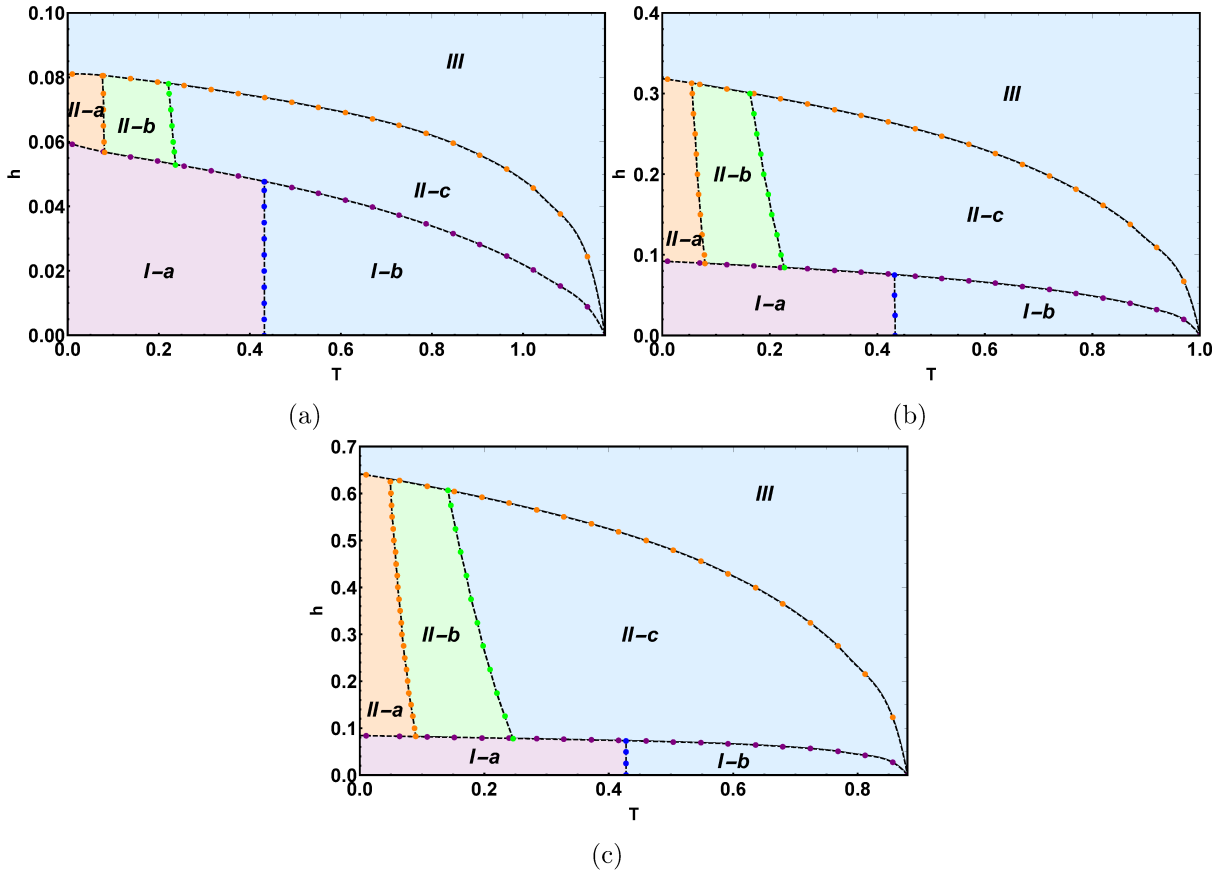


Figura 23 – Diagrama de fases para o parâmetro  $\alpha = 0.2$  com anisotropia (a)  $b = -0.3$  (b)  $b = 0$  e (c)  $b = 0.3$ .

Estudamos agora os efeitos de variar o parâmetro  $\alpha$  para um mesmo valor de anisotropia  $b$ . A figura 24 contém os resultados obtidos para um valor de anisotropia  $b = -0.3$ . Aqui notamos um crescimento na estabilidade da fase helicoidal sólida com o aumento do parâmetro  $\alpha$ , bem como da região sólida da textura de *skyrmions*. Outro efeito interessante a ser observado se deve ao formato das curvas. Notamos que as linhas que separam as fases topológicas do sistema no diagrama 24c se tornam mais curvas. A ausência de linhas curvas em pequenos valores do parâmetro  $\alpha$  pode ser atribuída a pequena extensão das fases moduladas na direção do campo magnético. Apesar do comportamento qualitativo ser o mesmo, para maiores valores do parâmetro  $\alpha$ , a linha de transição entre as fases topológicas percorre distâncias maiores dentro do diagrama.

Apesar do trabalho de Nishikawa *et al* [7] não apresentar a fase hexática, este comportamento curvo das linhas é observado, onde notamos ainda que a configuração sólida do diagrama é similar ao que encontramos.

Os últimos diagramas topológicos a serem analisados pertencem as figuras 22a e 22b, onde analisamos o comportamento reentrante do sistema. O resultado pode ser observado na figura 25.

Como não existe fase helicoidal para estes diagramas, analisamos apenas o comportamento da textura de *skyrmions*. Para o valor de anisotropia  $b = 0.55$  encontramos

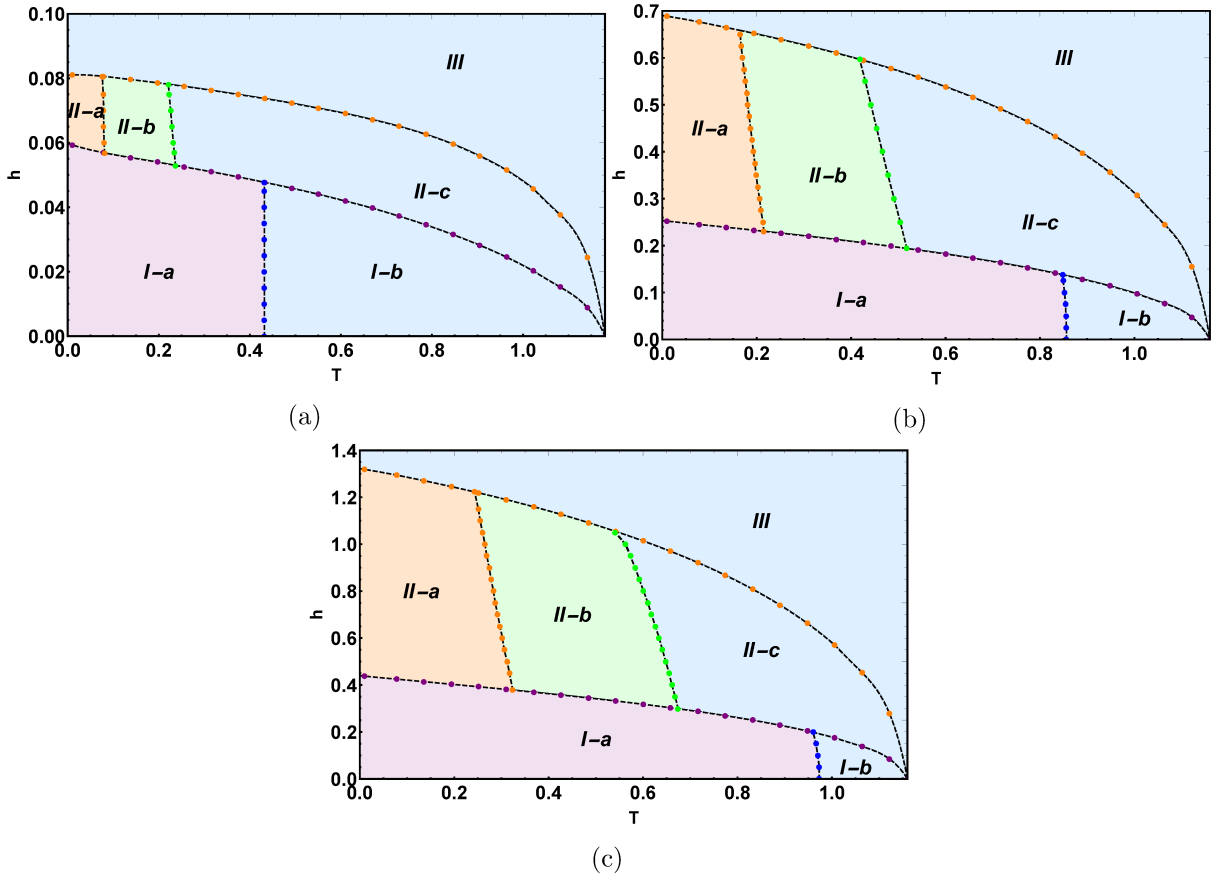


Figura 24 – Diagrama de fases para anisotropia  $\tilde{b} = -0.3$  com parâmetro (a)  $\alpha = 0.2$  (b)  $\alpha = 0.6$  e (c)  $\alpha = 1.0$ .

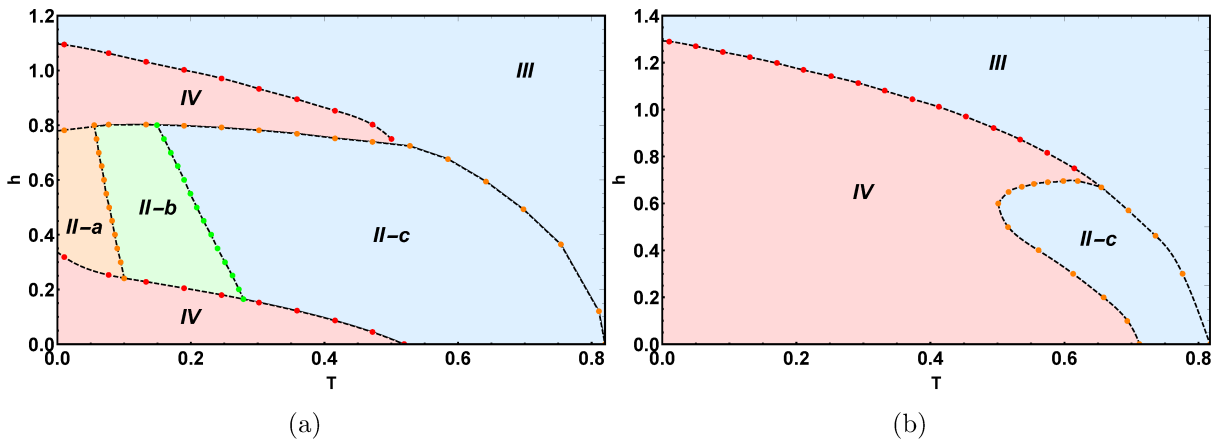


Figura 25 – Diagrama de fases reentrante para (a)  $b = 0.55$  e (b)  $b = 0.65$ .

a presença de uma fase sólida e hexática de *skyrmions*, enquanto que para  $b = 0.65$ , encontramos apenas a fase líquida de *skyrmions*.

Apesar dos diagramas de campo médio analisarem somente a estrutura local de nossas fases, é interessante notar o cenário construído com a inclusão das fases topológicas. Observamos pelas figuras 23, 24 e 25a que além das transições de fase topológicas previstas por Toner e Nelson [92], encontramos na região de baixas temperaturas a transição de um sólido de *skyrmions*, para um estado ferromagnético homogêneo em nosso sistema. Esta

transição pode ser observada analisando a linha crítica predita pelos resultados de campo médio, onde notamos que a partir de um dado valor de campo magnético próximo a esta linha, um aumento de nossa temperatura a um campo magnético constante realiza uma transição de primeira ordem em nosso sistema.

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação, caracterizamos e estudamos as propriedades do diagrama de fases de um sistema em duas dimensões que contém a interação de troca magnética, a interação de Dzyaloshinskii-Moriya e uma anisotropia *easy-plane* ou *easy-axis*. Analisamos não somente as fases pelas suas propriedades locais, mas também pelas suas propriedades em grandes escalas de comprimento.

Discutimos o uso de métodos como o campo médio variacional e analisamos o cenário *KTHNY* para o derretimento de uma rede triangular e um sistema de faixas em duas dimensões. A partir da investigação de campo médio, fomos capazes de construir um funcional energia livre através do parâmetro de ordem de magnetização do sistema. Como consequência, determinamos a forma do funcional energia livre para as estruturas moduladas em nosso modelo. Deste modo, a partir de considerações numéricas, construímos o diagrama de fases do estado fundamental e de temperatura finita do sistema. Observamos no estado fundamental que uma anisotropia uniaxial (*easy-axis*) prejudica a formação de estruturas moduladas, enquanto uma anisotropia *easy-plane* favorece a sua formação. Nossos diagramas de temperatura finita concordam com os resultados da literatura [3, 5, 26], bem como nossos diagramas de estado fundamental [100], mostrando uma grande estabilidade da textura de *skyrmions* em duas dimensões. O comportamento reentrante dos diagramas das figuras 22a e 22b demonstram efeitos interessantes que a anisotropia pode causar ao sistema, algo que foi pouco explorado ainda na literatura.

A partir do estudo de pequenas flutuações na fase helicoidal, fomos capazes de identificar a transição topológica entre a fase helicoidal sólida, que possui ordem posicional de curto alcance e ordem orientacional de quase longo alcance, e a fase helicoidal líquida, com ordem posicional e orientacional de curto alcance. Demonstramos que o efeito de pequenas flutuações na textura de *skyrmions* gera um hamiltoniano elástico efetivo similar a de uma rede triangular em duas dimensões. Como consequência, utilizamos os resultados do derretimento térmico de sistemas bidimensionais para estudar as propriedades topológicas da estrutura de *skyrmions*, onde identificamos uma fase sólida de *skyrmions*, uma fase hexática e uma fase líquida. Nesta análise, encontramos fases sólidas apenas em uma pequena região do diagrama de fases. Nosso diagrama de fases topológico difere daquele obtido experimentalmente por Huang *et al* [6], mas é semelhante ao encontrado por Nishikawa *et al* [7] em uma simulação.

Em relação a perspectivas futuras, gostaríamos de desenvolver um método auto consistente entre a teoria do funcional da densidade e os resultados da aplicação do grupo de renormalização, com o objetivo de obter um diagrama de fases não perturbativo para o sistema considerado.

# REFERÊNCIAS

- 1 BRUICE, P. Y. *Organic Chemistry 4th Edition*. [S.l.]: Pearson, 2003.
- 2 WILSON, M. et al. Chiral skyrmions in cubic helimagnet films: The role of uniaxial anisotropy. *Physical Review B*, APS, v. 89, n. 9, p. 094411, 2014.
- 3 YU, X. et al. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 465, n. 7300, p. 901, 2010.
- 4 FERT, A.; CROS, V.; SAMPAIO, J. Skyrmions on the track. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 3, p. 152, 2013.
- 5 SEKI, S. et al. Observation of skyrmions in a multiferroic material. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 336, n. 6078, p. 198–201, 2012.
- 6 HUANG, P. et al. Melting of a skyrmion lattice to a skyrmion liquid via a hexatic phase. *Nature Nanotechnology*, Nature Publishing Group, p. 1–7, 2020.
- 7 NISHIKAWA, Y.; HUKUSHIMA, K.; KRAUTH, W. Solid-liquid transition of skyrmions in a two-dimensional chiral magnet. *Physical Review B*, APS, v. 99, n. 6, p. 064435, 2019.
- 8 FRUCHART, O. et al. Self-organized growth of nanosized vertical magnetic co pillars on au (111). *Physical review letters*, APS, v. 83, n. 14, p. 2769, 1999.
- 9 BODE, M. et al. Experimental evidence for intra-atomic noncollinear magnetism at thin film probe tips. *Physical review letters*, APS, v. 86, n. 10, p. 2142, 2001.
- 10 LI, J.-L. et al. Spontaneous assembly of perfectly ordered identical-size nanocluster arrays. *Physical review letters*, APS, v. 88, n. 6, p. 066101, 2002.
- 11 VEDMEDENKO, E. Y. *Competing interactions and patterns in nanoworld*. [S.l.]: Wiley Online Library, 2007.
- 12 SEUL, M.; ANDELMAN, D. Domain shapes and patterns: the phenomenology of modulated phases. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 267, n. 5197, p. 476–483, 1995.
- 13 MENDOZA-COTO, A.; BARCI, D. G.; STARIOLO, D. A. Quantum and thermal melting of stripe forming systems with competing long-range interactions. *Physical Review B*, APS, v. 95, n. 14, p. 144209, 2017.
- 14 KARDAR, M. *Statistical physics of fields*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007.
- 15 MENDOZA-COTO, A. et al. Modulated systems in external fields: Conditions for the presence of reentrant phase diagrams. *Physical Review B*, APS, v. 94, n. 5, p. 054404, 2016.
- 16 SIEGEL, J. S. Single-handed cooperation. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 409, n. 6822, p. 777–778, 2001.
- 17 XIAO, W. et al. Microscopic origin of chiral shape induction in achiral crystals. *Nature chemistry*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 4, p. 326, 2016.

- 18 SAITO, R. et al. Electronic structure of chiral graphene tubules. *Applied physics letters*, American Institute of Physics, v. 60, n. 18, p. 2204–2206, 1992.
- 19 MA, W. et al. Chiral inorganic nanostructures. *Chemical reviews*, ACS Publications, v. 117, n. 12, p. 8041–8093, 2017.
- 20 YOON, T. P.; JACOBSEN, E. N. Privileged chiral catalysts. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 299, n. 5613, p. 1691–1693, 2003.
- 21 GELL-MANN, M.; OAKES, R. J.; RENNER, B. Behavior of current divergences under  $su(3) \times su(3)$ . *Physical Review*, APS, v. 175, n. 5, p. 2195, 1968.
- 22 WEINBERG, S. Nuclear forces from chiral lagrangians. *Physics Letters B*, Elsevier Science, v. 251, n. 2, p. 288–292, 1990.
- 23 MÜHLBAUER, S. et al. Skyrmion lattice in a chiral magnet. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 323, n. 5916, p. 915–919, 2009.
- 24 HAN, J. H. et al. Skyrmion lattice in a two-dimensional chiral magnet. *Physical Review B*, APS, v. 82, n. 9, p. 094429, 2010.
- 25 CLEMENTS, E. M. et al. Critical behavior and macroscopic phase diagram of the monoaxial chiral helimagnet  $Cr_2/3Nb_2S_8$ . *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 7, n. 1, p. 6545, 2017.
- 26 YU, X. et al. Near room-temperature formation of a skyrmion crystal in thin-films of the helimagnet  $FeGe$ . *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 10, n. 2, p. 106, 2011.
- 27 ADAMS, T. et al. Long-wavelength helimagnetic order and skyrmion lattice phase in  $Cu_2OSeO_3$ . *Physical review letters*, APS, v. 108, n. 23, p. 237204, 2012.
- 28 RUDIN, W. et al. *Principles of mathematical analysis*. [S.l.]: McGraw-hill New York, 1964. v. 3.
- 29 SCHWARZ, A. S. *Topology for physicists*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 308.
- 30 DZYALOSHINSKY, I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Elsevier, v. 4, n. 4, p. 241–255, 1958.
- 31 MORIYA, T. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical Review*, APS, v. 120, n. 1, p. 91, 1960.
- 32 FERRIANI, P. et al. Atomic-scale spin spiral with a unique rotational sense: Mn monolayer on  $W(001)$ . *Physical review letters*, APS, v. 101, n. 2, p. 027201, 2008.
- 33 BOGDANOV, A. N.; YABLONSKII, D. Thermodynamically stable “vortices” in magnetically ordered crystals. the mixed state of magnets. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, v. 95, n. 1, p. 178, 1989.
- 34 BOGDANOV, A.; HUBERT, A. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 138, n. 3, p. 255–269, 1994.



- 35 ABRIKOSOV, A. A. On the magnetic properties of superconductors of the second group. *Sov. Phys. JETP*, v. 5, p. 1174–1182, 1957.
- 36 SKYRME, T. H. R. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, Elsevier, v. 31, p. 556–569, 1962.
- 37 BOGDANOV, A. et al. Magnetic structures and reorientation transitions in noncentrosymmetric uniaxial antiferromagnets. *Physical Review B*, APS, v. 66, n. 21, p. 214410, 2002.
- 38 BOGDANOV, A.; HUBERT, A. The stability of vortex-like structures in uniaxial ferromagnets. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 195, n. 1, p. 182–192, 1999.
- 39 TONOMURA, A. et al. Real-space observation of skyrmion lattice in helimagnet mnsi thin samples. *Nano letters*, ACS Publications, v. 12, n. 3, p. 1673–1677, 2012.
- 40 ISHIKAWA, Y.; ARAI, M. Magnetic phase diagram of mnsi near critical temperature studied by neutron small angle scattering. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 53, n. 8, p. 2726–2733, 1984.
- 41 GRIGORIEV, S. et al. Magnetic structure of fe 1- x co x si in a magnetic field studied via small-angle polarized neutron diffraction. *Physical Review B*, APS, v. 76, n. 22, p. 224424, 2007.
- 42 MÜNZER, W. et al. Skyrmion lattice in the doped semiconductor fe 1- x co x si. *Physical Review B*, APS, v. 81, n. 4, p. 041203, 2010.
- 43 NEUBAUER, A. et al. Topological hall effect in the a phase of mnsi. *Physical review letters*, APS, v. 102, n. 18, p. 186602, 2009.
- 44 LEE, M. et al. Unusual hall effect anomaly in mnsi under pressure. *Physical review letters*, APS, v. 102, n. 18, p. 186601, 2009.
- 45 ONODA, M.; TATARA, G.; NAGAOSA, N. Anomalous hall effect and skyrmion number in real and momentum spaces. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 73, n. 10, p. 2624–2627, 2004.
- 46 BINZ, B.; VISHWANATH, A. Chirality induced anomalous-hall effect in helical spin crystals. *Physica B: Condensed Matter*, Elsevier, v. 403, n. 5-9, p. 1336–1340, 2008.
- 47 YI, S. D. et al. Skyrmions and anomalous hall effect in a dzyaloshinskii-moriya spiral magnet. *Physical Review B*, APS, v. 80, n. 5, p. 054416, 2009.
- 48 ZHU, J.-G.; ZHENG, Y.; PRINZ, G. A. Ultrahigh density vertical magnetoresistive random access memory. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 87, n. 9, p. 6668–6673, 2000.
- 49 BOHLENS, S. et al. Current controlled random-access memory based on magnetic vortex handedness. *Applied Physics Letters*, AIP, v. 93, n. 14, p. 142508, 2008.
- 50 SEKI, S. et al. Formation and rotation of skyrmion crystal in the chiral-lattice insulator cu<sub>2</sub>oseo<sub>3</sub>. *Physical Review B*, APS, v. 85, n. 22, p. 220406, 2012.

- 51 KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 6, n. 7, p. 1181, 1973.
- 52 HALPERIN, B.; NELSON, D. R. Theory of two-dimensional melting. *Physical Review Letters*, APS, v. 41, n. 2, p. 121, 1978.
- 53 YOUNG, A. Melting and the vector coulomb gas in two dimensions. *Physical Review B*, APS, v. 19, n. 4, p. 1855, 1979.
- 54 NAGAOSA, N.; TOKURA, Y. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 12, p. 899, 2013.
- 55 KÉZSMÁRKI, I. et al. Néel-type skyrmion lattice with confined orientation in the polar magnetic semiconductor  $\text{GaV}_4\text{S}_8$ . *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 14, n. 11, p. 1116–1122, 2015.
- 56 RUIZ, R.; BOSWORTH, J.; BLACK, C. Effect of structural anisotropy on the coarsening kinetics of diblock copolymer striped patterns. *Physical Review B*, APS, v. 77, n. 5, p. 054204, 2008.
- 57 VEGA, D. A. et al. Ordering mechanisms in two-dimensional sphere-forming block copolymers. *Physical Review E*, APS, v. 71, n. 6, p. 061803, 2005.
- 58 MALESCIO, G.; PELLICANE, G. Stripe patterns in two-dimensional systems with core-corona molecular architecture. *Physical Review E*, APS, v. 70, n. 2, p. 021202, 2004.
- 59 ROUSSET, S. et al. Self-ordering of  $\text{Au}$  (111) vicinal surfaces and application to nanostructure organized growth. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 15, n. 47, p. S3363, 2003.
- 60 PORTMANN, O.; VATERLAUS, A.; PESCIA, D. An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 422, n. 6933, p. 701–704, 2003.
- 61 SEUL, M. et al. Morphology and local structure in labyrinthine stripe domain phase. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 254, n. 5038, p. 1616–1618, 1991.
- 62 MURATOV, C. B. Theory of domain patterns in systems with long-range interactions of coulomb type. *Physical Review E*, APS, v. 66, n. 6, p. 066108, 2002.
- 63 MENDOZA-COTO, A.; STARIOLO, D. A.; NICOLAO, L. Nature of long-range order in stripe-forming systems with long-range repulsive interactions. *Physical review letters*, APS, v. 114, n. 11, p. 116101, 2015.
- 64 PLASS, R. et al. Nanostructures: Self-assembled domain patterns. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 412, n. 6850, p. 875, 2001.
- 65 WILLIAMS, H.; SHERWOOD, R. Magnetic domain patterns on thin films. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 28, n. 5, p. 548–555, 1957.
- 66 DE'BELL, K.; MACISAAC, A.; WHITEHEAD, J. Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 72, n. 1, p. 225, 2000.

- 67 CANNAS, S. A. et al. Ising nematic phase in ultrathin magnetic films: A monte carlo study. *Physical Review B*, APS, v. 73, n. 18, p. 184425, 2006.
- 68 KRONSEDER, M. et al. Real-time observation of domain fluctuations in a two-dimensional magnetic model system. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 6, p. 6832, 2015.
- 69 IWASAKI, J.; MOCHIZUKI, M.; NAGAOSA, N. Current-induced skyrmion dynamics in constricted geometries. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 10, p. 742, 2013.
- 70 LANDAU, L. D. *Collected papers of LD Landau*. [S.l.]: Pergamon, 1965.
- 71 ANDERSON, P. Antiferromagnetism. theory of superexchange interaction. *Physical Review*, APS, v. 79, n. 2, p. 350, 1950.
- 72 DZYALOSHINSKII, I. Theory of helicoidal structures in antiferromagnets. i. nonmetals. *Sov. Phys. JETP*, v. 19, n. 4, p. 960–971, 1964.
- 73 BAK, P.; JENSEN, M. H. Theory of helical magnetic structures and phase transitions in mnsi and fege. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 13, n. 31, p. L881, 1980.
- 74 KATAOKA, M.; NAKANISHI, O. Helical spin density wave due to antisymmetric exchange interaction. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 50, n. 12, p. 3888–3896, 1981.
- 75 FEYNMAN, R. *Statistical mechanics: a set of lectures (advanced book classics)*. 1998.
- 76 CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. [S.l.]: AAPT, 1998.
- 77 JAEGER, G. The ehrenfest classification of phase transitions: introduction and evolution. *Archive for history of exact sciences*, Springer, v. 53, n. 1, p. 51–81, 1998.
- 78 LANDAU, L. D. On the theory of phase transitions. *Ukr. J. Phys.*, v. 11, p. 19–32, 1937.
- 79 NELSON, D. R. *Defects and geometry in condensed matter physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2002.
- 80 KOSTERLITZ, J.; THOULESS, D. J. Two-dimensional physics. In: *Progress in low temperature physics*. [S.l.]: Elsevier, 1978. v. 7, p. 371–433.
- 81 BEREZINSKY, V. Destruction of long range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group. i. classical systems. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, v. 32, p. 493–500, 1970.
- 82 BEREZINSKY, V. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems possessing a continuous symmetry group. ii. quantum systems. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, v. 61, p. 610, 1972.
- 83 CHOU, C.-F. et al. Multiple-step melting in two-dimensional hexatic liquid-crystal films. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 280, n. 5368, p. 1424–1426, 1998.

- 84 ZAHN, K.; LENKE, R.; MARET, G. Two-stage melting of paramagnetic colloidal crystals in two dimensions. *Physical review letters*, APS, v. 82, n. 13, p. 2721, 1999.
- 85 NELSON, D. *Bond-orientational order in condensed matter systems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 86 SESHADRI, R.; WESTERVELT, R. Hexatic-to-liquid melting transition in two-dimensional magnetic-bubble lattices. *Physical review letters*, APS, v. 66, n. 21, p. 2774, 1991.
- 87 KNOBLER, C. M.; DESAI, R. C. Phase transitions in monolayers. *Annual review of physical chemistry*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 43, n. 1, p. 207–236, 1992.
- 88 MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Physical Review Letters*, APS, v. 17, n. 22, p. 1133, 1966.
- 89 HOHENBERG, P. C. Existence of long-range order in one and two dimensions. *Physical Review*, APS, v. 158, n. 2, p. 383, 1967.
- 90 NELSON, D. R.; HALPERIN, B. Dislocation-mediated melting in two dimensions. *Physical Review B*, APS, v. 19, n. 5, p. 2457, 1979.
- 91 STRANDBURG, K. J. Two-dimensional melting. *Reviews of modern physics*, APS, v. 60, n. 1, p. 161, 1988.
- 92 TONER, J.; NELSON, D. R. Smectic, cholesteric, and rayleigh-benard order in two dimensions. *Physical Review B*, APS, v. 23, n. 1, p. 316, 1981.
- 93 ABANOV, A. et al. Phase diagram of ultrathin ferromagnetic films with perpendicular anisotropy. *Physical Review B*, APS, v. 51, n. 2, p. 1023, 1995.
- 94 CHAIKIN, P. M.; LUBENSKY, T. C. *Principles of condensed matter physics*. [S.l.]: Cambridge university press Cambridge, 2000. v. 1.
- 95 KOSTERLITZ, J. M. Kosterlitz–thouless physics: a review of key issues. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 79, n. 2, p. 026001, 2016.
- 96 NELSON, D. R. Study of melting in two dimensions. *Physical Review B*, APS, v. 18, n. 5, p. 2318, 1978.
- 97 RÖSSLER, U. K.; LEONOV, A. A.; BOGDANOV, A. N. Chiral skyrmionic matter in non-centrosymmetric magnets. In: IOP PUBLISHING. *Journal of Physics: Conference Series*. [S.l.], 2011. v. 303, n. 1, p. 012105.
- 98 RADZIHOVSKY, L.; LUBENSKY, T. Nonlinear smectic elasticity of helical state in cholesteric liquid crystals and helimagnets. *Physical Review E*, APS, v. 83, n. 5, p. 051701, 2011.
- 99 KASHUBA, A.; POKROVSKY, V. L. Stripe domain structures in a thin ferromagnetic film. *Physical Review B*, APS, v. 48, n. 14, p. 10335, 1993.

- 
- 100 BANERJEE, S. et al. Enhanced stability of skyrmions in two-dimensional chiral magnets with rashba spin-orbit coupling. *Physical Review X*, APS, v. 4, n. 3, p. 031045, 2014.
- 101 JIANG, W. et al. Skyrmions in magnetic multilayers. *Physics Reports*, Elsevier, v. 704, p. 1–49, 2017.
- 102 TIMM, C. Theory of magnetism. *Lecture at the International Max Planck Research School for Dynamical Processes in Atoms, Molecules and Solids*, p. 1–93, 2011.
- 103 AMIT, D. J.; MARTIN-MAYOR, V. *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena: Graphs to Computers Third Edition*. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2005.
- 104 ZINN-JUSTIN, J. et al. *Phase transitions and renormalization group*. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2007.