



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CAMPUS DE FLORIANÓPOLIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA DA UFSC

Igor Guilherme Cambrussi Goelzer

**Fases moduladas em simulações de Monte Carlo  
para filmes magnéticos ultrafinos**

Florianópolis/SC

2024



FASES MODULADAS EM SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO  
PARA FILMES MAGNÉTICOS ULTRAFINOS

Igor Guilherme Cambrussi Goelzer

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física (PPGFSC), da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de Mestre em Física.  
Orientador: Lucas Nicolao

Florianópolis/SC

2024

Ficha catalográfica gerada por meio de sistema automatizado gerenciado pela BU/UFSC.  
Dados inseridos pelo próprio autor.

Cambrussi Goelzer, Igor Guilherme

Fases moduladas em simulações de Monte Carlo para filmes magnéticos ultrafinos / Igor Guilherme Cambrussi Goelzer ; orientador, Lucas Nicolao, 2024.

94 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas, Programa de Pós-Graduação em Física, Florianópolis, 2024.

Inclui referências.

1. Física. 2. Fases moduladas. 3. Filmes magnéticos ultrafinos. 4. Simulações de Monte Carlo. 5. Fusão de sólidos bidimensionais. I. Nicolao, Lucas. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

Igor Guilherme Cambrussi Goelzer

**Fases moduladas em simulações de Monte Carlo  
para filmes magnéticos ultrafinos**

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. Fábio Mallmann Zimmer, Dr.  
Universidade Federal do Mato Grosso do Sul

Prof. Lucas Álvares da Silva Mol, Dr.  
Universidade Federal de Minas Gerais

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

---

Coordenação do Programa de Pós-Graduação

---

Prof. Lucas Nicolao, Dr.  
Orientador

Florianópolis, 2024.

Dedico este trabalho a meu pai e amigo, Élio Neckel (*In Memoriam*)

# Agradecimentos

Ao meu orientador, professor Lucas Nicolao, pelo companheirismo, pelos ensinamentos profissionais e pela liberdade e apoio concedidos no desenvolvimento deste trabalho.

À minha mãe Lourdes Cambrussi e a meu pai Élio Neckel (*In Memoriam*), por todo o amor, carinho, confiança e incentivo à minha jornada.

A Rômulo Cenci, amigo e colega, cujo apoio foi fundamental para a obtenção dos resultados das simulações no presente trabalho.

Aos amigos e colegas que frequentam o laboratório de Mecânica Estatística e a Universidade Federal de Santa Catarina. Em especial, a Artur Dariva, Maria Eduarda Evangelista e Alyson Fernando de Barros, pelas conversas, pelo companheirismo e por terem tornado a experiência acadêmica um pouco mais leve.

Aos servidores e técnicos administrativos da Universidade Federal de Santa Catarina.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES).

*“Savor what you feel and what you see  
Things that may not seem important now  
But may be tomorrow”*

“Saboreie o que você sente e o que você vê  
Coisas que podem não parecer importantes agora  
Mas talvez sejam amanhã”

Chuck Schuldiner (Symbolic - Death)

# Resumo

Estudamos um modelo microscópico simples para filmes magnéticos ultrafinos com forte anisotropia uniaxial para fora do plano do filme. A presença de interações competitivas de troca ferromagnética de curto alcance e dipolar de longo alcance resulta numa modulação do parâmetro de ordem em faixas de magnetização alternadas. As faixas podem se organizar de diferentes maneiras à medida que a temperatura aumenta, de acordo com a ordem posicional e orientacional das faixas. Investigamos as fases e transições de fase presentes no modelo através de simulações de Monte Carlo com os algoritmos de Metropolis e de *Parallel Tempering*. Conseguimos identificar a presença de três fases termodinâmicas: a *fase de faixas* a baixas temperaturas, que possui ordens posicional e orientacional; a *fase nemática* em temperaturas intermediárias, que apresenta apenas ordem orientacional; e a fase desordenada chamada *líquido-tetragonal* em altas temperaturas. A partir de medidas do calor específico e das susceptibilidades dos parâmetros de ordem posicional e orientacional, conseguimos identificar a faixa de temperaturas em que a fase nemática é estável, concordando com resultados prévios e com um dos cenários previstos para esses sistemas magnéticos. Nossos resultados a respeito da natureza das duas transições de fase são inconclusivos devido aos fortes efeitos de tamanho finito, e a investigação de sistemas maiores ainda se faz necessária para caracterizar essas transições.

**Palavras-chave:** Filmes magnéticos ultrafinos. Fases Moduladas. Interações competitivas. Fase nemática. Fusão de sólidos bidimensionais. Defeitos topológicos. Simulações de Monte Carlo. Parallel Tempering.

# Abstract

We study a simple microscopic model for ultrathin magnetic films with strong uniaxial anisotropy perpendicular to the film plane. The presence of competing short range ferromagnetic exchange and long-range antiferromagnetic dipolar interactions results in a modulation of the order parameter in stripes with alternating magnetization. These stripes may present different organizations as the temperature is raised, according to the positional and orientational orders of the stripes. We investigate the phases and phase transitions in this model by means of Monte Carlo simulations with the Metropolis and *Parallel Tempering* algorithms. We were able to identify the presence of three thermodynamic phases: the *stripe phase* at low temperatures, which presents both positional and orientational orders; the *nematic phase* at intermediate temperatures, which presents only orientational order; and the disordered phase called *tetragonal-liquid* at high temperatures. Using the specific heat and order parameter susceptibilities data, we were able to identify the range of temperatures in which the nematic phase is stable, in agreement with previous results and with one of the scenarios for these magnetic systems. Our results regarding the nature of both transitions are still inconclusive due to the strong finite size effects, and the simulation of even larger systems is still necessary in order to characterize these transitions.

**Keywords:** Ultrathin magnetic films. Modulated phases. Competing interactions. Nematic phase. Two-dimensional melting. Topological defects. Monte Carlo Simulations. Parallel Tempering.

# Lista de ilustrações

- Figura 1 – Domínios magnéticos em sólidos e fluidos magnéticos. Fase de (A) faixas e (B) bolhas em um filme magnético de granada com  $13 \mu\text{m}$  de espessura crescido na face  $\langle 111 \rangle$  da granada de gadolínio e gálio (GGG), com período de  $\sim 10 \mu\text{m}$ . (C e D) Ferrofluido confinado entre placas de vidro, sujeito a um campo magnético perpendicular à camada de fluido, exibindo fases labirínticas (C) e de bolhas (D) com período de  $\sim 4 \mu\text{m}$ . Magnetização positiva (em amarelo) e negativa (em preto). Fonte: [1] . . . . . 1
- Figura 2 – Imagens de microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização (SEMPA) das estruturas de domínios em filmes magnéticos ultrafinos de Fe(fcc)/Cu(001). A temperatura efetiva aumenta da esquerda para a direita. (a) Fase de faixas a baixas temperaturas; (b) fase labiríntica; (c) reentrância na fase de faixas; (d) fase paramagnética. Não há a aplicação de campos magnéticos externos. Fonte: [11] . . . . . 4
- Figura 3 – Representação esquemática da magnetização perpendicular ao plano do filme ( $T < T_O$ , linha contínua) e paralela ao plano do filme ( $T > T_R$ , linha tracejada) observada por Pappas e coautores (1990). Fonte: figura adaptada de [15]. . . . . 6
- Figura 4 – Imagens de microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização das fases (a) esmética, (b) nemática e (c) líquido-tetragonal em filmes magnéticos ultrafinos de Fe(fcc)/Cu(001). (a) Fase esmética com  $T = 293 \text{ K}$  e espessura de  $2.44 \text{ ML}$  apresentando várias dislocações; em detalhe o fator de estrutura. (b) Fase nemática com  $T = 300 \text{ K}$  e espessura de  $2.6 \text{ ML}$ ; em detalhe o fator de estrutura. (c) Fase líquido-tetragonal (desordenada) à mesma temperatura, mas com espessura de  $2.19 \text{ ML}$ ; em detalhe o fator de estrutura e uma disclinação. Fonte: figuras (a) e (c) adaptadas de [11]; figura (b) adaptada de [13]. . . . . 7
- Figura 5 – Ilustração das configurações de magnetização que (a) minimizam e (b) maximizam a energia dipolar. Fonte: figuras adaptadas de [14]. . . . . 9

Figura 6 – Ilustração de alguns dos possíveis estados fundamentais do modelo <i>Ising dipolar</i> (2.5). Configurações extraídas das nossas simulações de Monte Carlo do modelo com $L = 64$ e (a) $\delta \gg 1$ , $h > L$ ; (b) $\delta < 0.425$ ; (c) $\delta = 1$ ; (d) $\delta = 2$ . O estado ferromagnético (a) nunca é o estado fundamental do sistema [31], e essa configuração ilustra um efeito do tamanho finito das simulações, quando a largura das faixas $h$ é maior que o tamanho linear do sistema simulado $L$ , devido ao crescimento exponencial da largura das faixas com o valor de $\delta$ . . . . .	12
Figura 7 – Acima, representação esquemática dos tipos de (a) dislocação e (b,c) disclinações que podem ocorrer na fase de faixas. Fonte: [2]. Abaixo, os mesmos defeitos, extraídos de configurações dos spins das nossas simulações de Monte Carlo do Hamiltoniano (2.5). . . . .	14
Figura 8 – Fase esmética estável apenas para $T = 0$ K, tornando-se uma fase nemática para qualquer temperatura finita devido às flutuações das paredes de domínio. Com o aumento da temperatura, a fase nemática passa à fase isotrópica em $T_c$ através de uma transição de dissociação de disclinações. Fonte: [36]. . . . .	15
Figura 9 – (a) Diagrama de fases $(\delta, T)$ de campo médio. Os números na região de baixas temperaturas indicam a largura $h$ de equilíbrio das faixas de cada fase. A linha sólida corresponde à temperatura crítica $T_c(\delta)$ . A linha tracejada corresponde a uma transição de primeira ordem entre as fases ordenadas. <i>Inset</i> : <i>Zoom</i> na região híbrida entre as faixas de largura $h = 1$ e $h = 2$ . (b) <i>Zoom</i> na região $1.6 < \delta < 2.4$ . Fonte: [9]. . .	19
Figura 10 – Notação de Selke e Fisher para os estados híbridos. Fonte: [42, 9]. . .	20
Figura 11 – Configurações de algumas das fases do modelo <i>Ising dipolar</i> (2.5) extraídas das nossas simulações de Monte Carlo com $L = 64$ e (a) $\delta = 0.35$ , $T_a = 0.15$ ; (b) $\delta = 0.43$ , $T_b = 0.16$ ; (c,d,e,f) $\delta = 2$ e temperaturas $T_c = 0.65$ , $T_d = 0.79$ , $T_e = 0.9$ e $T_f = 6.0$ . . . . .	22
Figura 12 – Diagrama de fases $(\delta, T)$ de Monte Carlo para para $0 \leq \delta \leq 2$ . Os triângulos denotam as temperaturas críticas $T_c(\delta)$ obtidas através do calor específico para a transição entre as fases de faixas $h_1$ e $h_2$ e a fase paramagnética. Os diamantes denotam a linha de transição de primeira ordem entre as fases $h_1$ e $h_2$ . A região sombreada corresponde à presença de estados metaestáveis. Fonte: [29]. . . . .	23
Figura 13 – Diagrama de fases $(\delta, T)$ de Monte Carlo. Os números indicam a largura $h$ de equilíbrio das fases de faixas de baixas temperaturas. A ordem das transições está indicada no <i>inset</i> . Fonte: [9]. . . . .	24

Figura 14 – Diagrama de fases $(\delta, T)$ para $2 \leq \delta \leq 3.6$ . As temperaturas $T_1$ (triângulos) e $T_2$ (quadrados) denotam as temperaturas de transição faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal, respectivamente. As linhas tracejadas representam as transições de primeira ordem entre estados de faixas com diferentes larguras. Os números indicam a largura $h$ de equilíbrio das fases de faixas de baixas temperaturas. Em detalhe, o diagrama de fases completo a partir de $\delta = 0$ . Fonte: [10]. . . . .	24
Figura 15 – Condições de contorno periódicas na rede bidimensional quadrada. Fonte: [55] . . . . .	33
Figura 16 – Convenção da mínima imagem na rede bidimensional quadrada. A linha vermelha mostra a menor distância, utilizada para calcular a interação dipolar. As linhas azuis mostram as outras distâncias consideradas. Fonte: figura adaptada de [56] . . . . .	33
Figura 17 – Função de autocorrelação de energia em função dos passos de Monte Carlo para diferentes temperaturas no modelo <i>Ising dipolar</i> com $L = 64$ e $\delta = 2$ . As medidas de energia estão descorrelacionadas após $t_{max} \approx 10^4$ MCS. . . . .	37
Figura 18 – (a) Evolução da distribuição de temperaturas com as iterações do método de Hukushima e Nemoto [7] para o modelo <i>Ising dipolar</i> com $L = 56$ , $\delta = 2$ e $M = 100$ temperaturas inicialmente equiespaçadas em $\beta$ (i.e. $\beta_{m+1} = \beta_m + \Delta$ ). (b) Distribuição final de temperaturas para diferentes tamanhos do sistema, inicialmente equiespaçadas em $\beta$ . As distribuições de temperatura dos diferentes tamanhos de sistema convergiram para o mesmo conjunto de temperaturas. . . . .	39
Figura 19 – Probabilidade de aceitação das trocas de temperatura em função da temperatura para $L = 56$ e $\delta = 2$ . Note o acúmulo de temperaturas em torno da região crítica. A probabilidade de aceitação média de trocas entre réplicas foi $p_{acc,med} \approx 0.80 \pm 0.04$ . . . . .	40
Figura 20 – Comparação das distribuições de temperatura com intervalos constantes em $\beta = 1/T$ ( $\beta_{i+1} = \beta_i + \delta$ ), intervalos constantes em $T$ ( $T_{i+1} = T_i + \delta$ ) e pelo método iterativo de Hukushima e Nemoto [7]. . . . .	40
Figura 21 – Parâmetros de ordem posicional $m_{st}$ e orientacional $ \eta $ em função da temperatura para $\delta = 2$ e diferentes tamanhos do sistema. A fase nemática está presente na faixa de temperaturas $0.78 \lesssim T \lesssim 0.82$ . As barras de erro foram ocultadas pois seus tamanhos foram inferiores aos dos pontos. . . . .	43
Figura 22 – Susceptibilidades dos parâmetros de ordem posicional e orientacional em função da temperatura para $\delta = 2$ e diferentes tamanhos do sistema. . . . .	44

Figura 23 – Cumulantes de Binder dos parâmetros de ordem posicional e orientacional em função da temperatura para $\delta = 2$ e diferentes tamanhos de sistemas. . . . .	45
Figura 24 – Calor específico e cumulante de Binder da energia em função da temperatura para $\delta = 2$ diferentes tamanhos de sistemas. . . . .	46
Figura 25 – Distribuições de (a) energia por spin e parâmetros de ordem (b) posicional e (c) orientacional na fase de faixas, para $T = 0.765$ , $\delta = 2$ e $L = 64$ . Em detalhe, a configuração típica da fase de faixas. As linhas vermelhas mostram o valor da energia por spin ( $E/N = -1.187$ ) e dos parâmetros de ordem posicional ( $m_{st} = 0.983$ ) e orientacional ( $ \eta  = 0.957$ ) da configuração típica. . . . .	48
Figura 26 – Distribuições de (a) energia por spin e parâmetros de ordem (b) posicional e (c) orientacional na fase nemática, para $T = 0.790$ , $\delta = 2$ e $L = 64$ . Em detalhe, a configuração típica da fase nemática. As linhas vermelhas mostram o valor da energia por spin ( $E/N = -1.137$ ) e dos parâmetros de ordem posicional ( $m_{st} = 0.173$ ) e orientacional ( $ \eta  = 0.832$ ) da configuração típica. . . . .	49
Figura 27 – Distribuições de (a) energia por spin e parâmetros de ordem (b) posicional e (c) orientacional na fase líquido-tetragonal, para $T = 0.820$ , $\delta = 2$ e $L = 64$ . Em detalhe, a configuração típica da fase líquido-tetragonal. As linhas azuis mostram o valor da energia por spin ( $E/N \approx -1.02$ ) e dos parâmetros de ordem posicional ( $m_{st} \approx 0.081$ ) e orientacional ( $ \eta  \approx 0.055$ ) da configuração típica. . . . .	50
Figura 28 – Funções de correlação (a) espaciais e (b) orientacionais na fase de faixas de largura $h = 2$ . Configurações finais (c) da rede e (d) do campo orientacional, com parâmetros $L = 128$ , $\delta = 2$ e $T = 0.760$ . . . . .	52
Figura 29 – Funções de correlação (a) espaciais e (b) orientacionais na fase nemática. Configurações finais (c) da rede e (d) do campo orientacional, com parâmetros $L = 128$ , $\delta = 2$ e $T = 0.790$ . O decaimento das funções de correlação espaciais indica uma ordem posicional de curto alcance. O decaimento das funções de correlação orientacionais para uma constante nas duas direções principais indica a ordem orientacional de longo alcance, que caracteriza a fase nemática. . . . .	53
Figura 30 – Funções de correlação espaciais na fase nemática nas direções perpendicular ( $x$ ) e paralela ( $y$ ) às faixas, com $T = 0.79$ , $\delta = 2$ e $L = 128$ . A linha contínua mostra um ajuste por uma função do tipo $f(r) = Ae^{-r/\xi} \cos(k_0 r + \phi)$ . Em detalhe, o plot log-log de $C_y$ mostra um decaimento do tipo lei de potência para longas distâncias $r^{-\omega}$ , com $\omega \approx 0.116$ . Os detalhes sobre o ajuste são discutidos no texto. . . . .	54

Figura 31 – Funções de correlação (a) espaciais e (b) orientacionais na fase líquido-tetragonal. Configurações finais (c) da rede e (d) do campo orientacional, com parâmetros $L = 128, \delta = 2$ e $T = 0.820$ . . . . .	55
Figura 32 – Distribuições de energia por spin (a,b) e parâmetros de ordem orientacional (c,d) e posicional (e,f) para $L = 64, \delta = 2$ e temperaturas na vizinhança da transição faixas-nemática $T_c^{(1)} \approx 0.773$ e nemática-líquido-tetragonal $T_c^{(2)} \approx 0.803$ . . . . .	56
Figura 33 – Coexistência na transição faixas-nemática para $T = 0.773$ e $L = 64$ . As configurações típicas são mostradas. . . . .	57
Figura 34 – Coexistência na transição nemática-líquido-tetragonal para $T = 0.803$ e $L = 64$ . As configurações típicas são mostradas. . . . .	57
Figura 35 – Escalonamento de tamanho finito dos máximos do calor específico e mínimos do cumulante de Binder. As barras de erro foram obtidas considerando um ajuste parabólico em torno dos máximos/mínimos. . . . .	59
Figura 36 – Escalonamento de tamanho finito dos máximos das susceptibilidades posicional e orientacional. As barras de erro foram obtidas considerando um ajuste parabólico em torno dos máximos. . . . .	60
Figura 37 – Comparação do comportamento de quantidades termodinâmicas relevantes utilizando os métodos de Somas de Ewald e Convenção da Mínima Imagem (MIC) para $L = 48$ e $\delta = 2$ . . . . .	75

# Lista de tabelas

Tabela 1	– Pseudo-temperaturas críticas $T_1^c(L)$ e $T_2^c(L)$ ( $T_1^v(L), T_2^v(L)$ ) obtidas através dos máximos (mínimos) de menor e maior temperatura do calor específico (cumulante de Binder), respectivamente. . . . .	59
Tabela 2	– Pseudo-temperaturas críticas $T_1^{mst}(L)$ e $T_2^\chi(L)$ obtidas através dos máximos das susceptibilidades posicional e orientacional, respectivamente.	60
Tabela 3	– Temperaturas das transições faixas-nemática $T_1$ e nemática-líquido-tetragonal $T_2$ obtidas através das análises de escalonamento finito do calor específico $C(L, T)$ , do cumulante de Binder da energia $V_e(L, T)$ , das susceptibilidades posicional $\chi_{mst}(L, T)$ e orientacional $\chi_\eta(L, T)$ e do cruzamento dos cumulantes orientacionais $V_\eta(L, T)$ . . . . .	61
Tabela 4	– Tempo aproximado das simulações do modelo Ising dipolar com o algoritmo de Parallel Tempering, para $\delta = 2$ , $t_{max} = 10^4$ MCS, $N_{swaps} = 10^4$ MCS e $M = 100$ temperaturas (sistemas). . . . .	76

# Lista de abreviaturas e siglas

AF: *Antiferromagnetic* (Antiferromagnético)

FSS: *Finite Size Scaling* (Escalonamento de Tamanho Finito)

IRC: *Irregular Checkerboard* (Tabuleiro de Xadrez Irregular)

KT: Kosterlitz-Thouless

KTHNY: Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young

LRO: *Long Range Order* (Ordem de Longo Alcance)

MBE: *Molecular Beam Epitaxy* (Epitaxia por Feixe Molecular)

MC: *Monte Carlo*

MCS: *Monte Carlo Step* (Passo de Monte Carlo)

MF: *Mean Field* (Campo Médio)

MIC: *Minimum Image Convention* (Convenção da Mínima Imagem)

ML: *Monolayer* (Monocamada)

PEEM: *Photoemission Electronic Microscopy* (Microscopia Eletrônica por Fotoemissão)

QLRO: *Quasi-Long Range Order* (Ordem de Quase-Longo Alcance)

SEMPA: *Scanning Electron Microscopy with Polarization Analysis* (Microscopia Eletrônica de Varredura com Análise de Polarização)

SRT: *Spin Reorientation Transition* (Transição de Reorientação dos Spins)

SSFD: *Single Spin Flip Dynamics* (Dinâmica de Inversão de Um Único Spin)

TL: *Tetragonal-Liquid* (Líquido-Tetragonal)

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>4</b>
<b>2.1</b>	<b>Sistema Experimental: Filmes Magnéticos Ultrafinos</b>	<b>4</b>
<b>2.2</b>	<b>Modelo Microscópico: Ising Dipolar</b>	<b>6</b>
2.2.1	Energias Relevantes	7
2.2.2	Limite Ultrafino: Alta Anisotropia de Superfície	10
2.2.3	Estado Fundamental	11
2.2.4	Propriedades de Temperatura Finita	12
<b>2.3</b>	<b>Aproximação de Campo Médio</b>	<b>16</b>
<b>2.4</b>	<b>Simulações</b>	<b>20</b>
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>25</b>
<b>3.1</b>	<b>Simulações de Monte Carlo</b>	<b>26</b>
3.1.1	Algoritmo de Metropolis	29
<b>3.2</b>	<b>Condições de Contorno Periódicas</b>	<b>32</b>
<b>3.3</b>	<b>Parallel Tempering</b>	<b>34</b>
3.3.1	Distribuição de Temperaturas	38
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>41</b>
<b>4.1</b>	<b>Momentos da Energia e dos Parâmetros de Ordem</b>	<b>42</b>
<b>4.2</b>	<b>Análise das Fases Individuais</b>	<b>47</b>
4.2.1	Distribuições de Energia e Parâmetros de Ordem	47
4.2.2	Funções de Correlação	49
<b>4.3</b>	<b>Análise das Transições de Fase</b>	<b>54</b>
4.3.1	Escalonamento de Tamanho Finito	57
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>63</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>66</b>
	<b>APÊNDICE A – SOMAS DE EWALD E CONVENÇÃO DA MÍNIMA IMAGEM</b>	<b>74</b>
	<b>APÊNDICE B – INFORMAÇÕES TÉCNICAS</b>	<b>76</b>

# 1 Introdução

As *fases moduladas* são fases termodinâmicas caracterizadas por padrões espaciais em escalas microscópicas ou mesoscópicas, que podem ser ordenados ou não. Muitos sistemas magnéticos, com diferentes composições e formatos, apresentam fases moduladas de equilíbrio, que correspondem a estados com uma magnetização que varia espacialmente, formando padrões complexos com detalhes que dependem do sistema em questão.

A figura 1 ilustra alguns sistemas magnéticos que apresentam fases de equilíbrio que formam padrões de faixas e bolhas. O surgimento de fases moduladas com padrões em escalas microscópicas ou mesoscópicas, com características estruturais similares e exibindo modos de evolução similares sugere a possibilidade de um mecanismo universal para a formação desses padrões. Um dos mecanismos responsáveis pela formação de padrões é a competição de interações que atuam em diferentes escalas de comprimento. A competição de interações pode levar o sistema a apresentar o fenômeno de frustração, quando o sistema é incapaz de satisfazer todas as interações às quais está sujeito. A modulação da magnetização é um resultado do compromisso do sistema em tentar satisfazer todas essas interações.

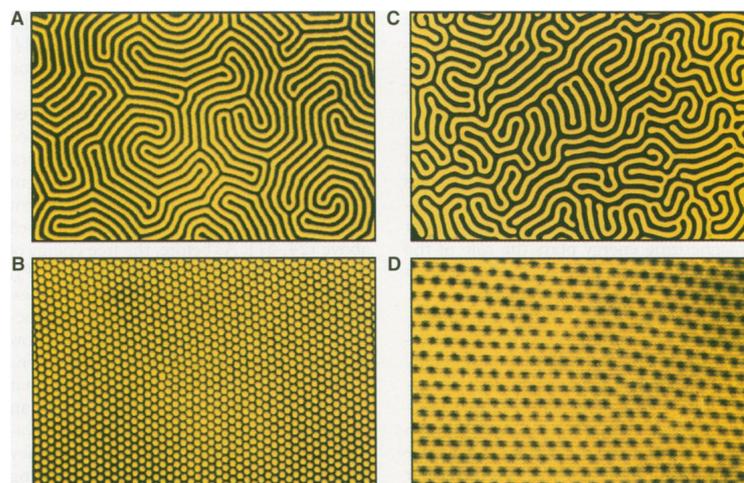


Figura 1 – Domínios magnéticos em sólidos e fluidos magnéticos. Fase de (A) faixas e (B) bolhas em um filme magnético de granada com  $13 \mu\text{m}$  de espessura crescido na face  $\langle 111 \rangle$  da granada de gadolínio e gálio (GGG), com período de  $\sim 10 \mu\text{m}$ . (C e D) Ferrofluido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

Filmes finos magnéticos, e em especial os filmes magnéticos ultrafinos de metal sobre metal (com espessuras entre 1 e 10 monocamadas atômicas) apresentam fases

moduladas com padrões espaciais simples com algum grau de regularidade, como faixas ou bolhas. Nesses filmes, a modulação é um resultado da competição entre a interação de troca (ferromagnética de curto alcance) e a interação dipolar (antiferromagnética de longo alcance). Os filmes magnéticos ultrafinos podem ser produzidos através de técnicas de deposição como epitaxia por feixe molecular (MBE). Os domínios magnéticos nesses materiais podem ser visualizados através de técnicas de caracterização como microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização (SEMPA) e microscopia eletrônica por fotoemissão (PEEM). Esses filmes servem como um importante campo de testes para o estudo das interações microscópicas nesses materiais e da física em duas dimensões. Esses materiais possuem diversas aplicações tecnológicas em armazenamento de dados, sensores magnéticos, eletrônica e catálise [2].

Neste trabalho, estamos interessados em estudar as propriedades termodinâmicas de equilíbrio e as transições de fase que esses filmes ultrafinos apresentam. Uma descrição teórica realística desses sistemas deve incluir, além da interação de troca ferromagnética de curto alcance, a interação dipolar de longo alcance [2]. Muitos estudos teóricos de sistemas magnéticos ignoram a interação dipolar por ela ser muito fraca em relação à interação de troca. No entanto, a interação dipolar possui um papel essencial no estabelecimento de uma ordem magnética de longo alcance nesses sistemas, bem como na determinação da morfologia dos estados ordenados. É a ação combinada das interações de curto e longo alcance que resulta na rica variedade de propriedades magnéticas desses sistemas.

Frequentemente as fases moduladas apresentam ordens intermediárias entre as de um líquido e de um sólido, e os sistemas mais conhecidos e estudados que apresentam esse tipo de ordem são os cristais líquidos. Os cristais líquidos são geralmente constituídos por moléculas orgânicas altamente anisotrópicas, e a ordem emerge como um resultado da forma da molécula. Os cristais líquidos apresentam uma rica diversidade de fases, mas estamos especialmente interessados em duas delas: i) a fase *esmética*, que possui tanto ordem posicional quanto ordem orientacional; e ii) a fase *nemática*, que possui apenas ordem orientacional. Essa analogia entre as fases moduladas e as fases líquido-cristalinas permite a aplicação de resultados bem conhecidos de cristais líquidos para prever quantitativa e qualitativamente o comportamento das fases moduladas. No entanto, quando buscamos compreender a natureza termodinâmica das fases em filmes magnéticos ultrafinos, essa analogia deve ser considerada com cuidado, pois as unidades básicas em cristais líquidos e em sistemas magnéticos são fundamentalmente diferentes [3].

Além da fase esmética observada experimentalmente a baixas temperaturas, é possível que entre essa fase e a fase labiríntica (líquido-tetragonal) exista uma fase intermediária, apenas com ordem orientacional, denominada fase nemática (ou Ising nemática). A ocorrência das fases esmética e nemática nesses sistemas é um exemplo do problema da fusão de sólidos bidimensionais: enquanto algumas teorias evidenciam o papel dos defeitos

topológicos e preveem a ocorrência de fases intermediárias e transições de fase contínuas [4], outras sugerem uma transição de fase de primeira ordem para a fase desordenada de altas temperaturas [5, 6].

O capítulo 2 dessa dissertação constitui uma revisão bibliográfica sobre os principais fenômenos e propriedades presentes nos filmes magnéticos ultrafinos e no modelo microscópico utilizado para descrever esses sistemas - o modelo *Ising dipolar* - que constitui o objeto de estudo deste trabalho. Nesse capítulo, serão revisadas as principais propriedades desse modelo na aproximação de campo médio (Sec. 2.3) e nas simulações (Sec. 2.4) presentes na literatura, no limite de campos externos nulos.

Esta pesquisa tem como primeiro objetivo o desenvolvimento de um algoritmo otimizado que minimize algumas das dificuldades encontradas nas simulações de Monte Carlo do modelo *Ising dipolar*, especialmente aquelas relacionadas aos longos tempos de relaxação de equilíbrio devido à frustração e à metaestabilidade. Para esse fim, estudamos o modelo *Ising dipolar* através de simulações de Monte Carlo com o algoritmo de Metropolis e com o método de *Parallel Tempering* [7], descritos em detalhe no capítulo 3.

O principal objetivo do presente trabalho é estudar as transições de fase entre as fases moduladas de faixas e a fase líquido-tetragonal, a fim de determinar se a fase nemática intermediária está presente, onde ela se encontra no diagrama de fases e se ela é estável no limite termodinâmico. Estamos também interessados em caracterizar as transições de fase faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal.

Os resultados das simulações com se encontram no capítulo 4. Essas simulações foram capazes de identificar três fases de equilíbrio, nominalmente: a fase de faixas, a fase nemática e a fase líquido-tetragonal. Nossos resultados apontam para a presença de uma fase nemática intermediária entre as fases de faixas e líquido-tetragonal, em uma região muito estreita de temperaturas. As temperaturas de transição no limite termodinâmico são obtidas através das análises de escalonamento de tamanho finito dos momentos da energia e dos parâmetros de ordem (Sec. 4.3.1), que forneceram valores consistentes com resultados de outras simulações de Monte Carlo reportadas na literatura [8, 9, 10]. Nossos resultados a respeito da natureza dessas transições são inconclusivos devido aos fortes efeitos de tamanho finito nas simulações. A presença de coexistência nas duas transições de fase sugere que ambas as transições são de primeira ordem, mas algumas quantidades apresentaram comportamento atípico para uma transição desse tipo. A simulação de sistemas maiores ainda se faz necessária para que essas transições possam ser caracterizadas adequadamente.

## 2 Revisão Bibliográfica

Neste capítulo apresentamos a fenomenologia e as propriedades gerais dos filmes magnéticos ultrafinos com forte anisotropia uniaxial perpendicular ao plano do filme. Introduzimos o sistema experimental de interesse na seção 2.1, abordando alguns dos fenômenos que esses materiais apresentam, como a competição de interações, a frustração e a formação de padrões. Apresentamos o modelo microscópico que constitui o objeto de estudo do presente trabalho na seção 2.2, onde são discutidas as energias relevantes, os estados fundamentais e algumas propriedades de temperatura finita do modelo. Recapitulamos as principais propriedades do modelo Ising dipolar na aproximação de campo médio na seção 2.3. Por fim, revisamos os principais resultados das simulações do modelo presentes na literatura na seção 2.4.

### 2.1 Sistema Experimental: Filmes Magnéticos Ultrafinos

O sistema experimental de interesse para o presente trabalho são os filmes magnéticos ultrafinos: filmes de metal depositados sobre um substrato metálico (e.g. Fe/Cu, Co/Cu, Co/Au), com espessuras entre 1 e 10 monocamadas atômicas (ML). Esses filmes apresentam *fases moduladas* de equilíbrio, caracterizadas por um parâmetro de ordem (e.g. magnetização) que varia no espaço, podendo formar padrões com alguma periodicidade, como faixas e bolhas em sistemas bidimensionais. Imagens de microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização (SEMPA) mostram que os domínios magnéticos nesses materiais se organizam espontaneamente em estruturas moduladas de faixas, podendo apresentar uma organização em camadas (Fig. 2(a)) e padrões labirínticos (Fig. 2(b)).

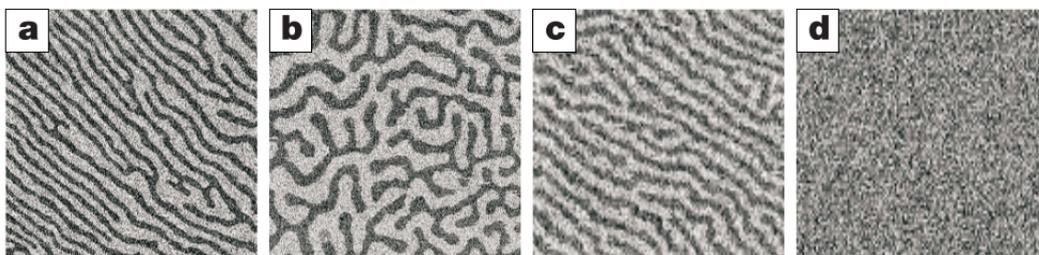


Figura 2 – Imagens de microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização (SEMPA) das estruturas de domínios em filmes magnéticos ultrafinos de Fe(fcc)/Cu(001). A temperatura efetiva aumenta da esquerda para a direita. (a) Fase de faixas a baixas temperaturas; (b) fase labiríntica; (c) reentrância na fase de faixas; (d) fase paramagnética. Não há a aplicação de campos magnéticos externos. Fonte: [11]

As fases moduladas são manifestações dos fenômenos de formação de padrões [1]. Um dos mecanismos físicos responsáveis pela formação de padrões é a *frustração* gerada pela presença de *interações competitivas* no sistema. No caso dos filmes magnéticos ultrafinos, a competição se dá entre as interações de troca (ferromagnética de curto alcance) e dipolar (antiferromagnética de longo alcance), que favorecem fenômenos opostos: alinhamentos paralelos e anti-paralelos dos spins, respectivamente. O sistema é dito *frustrado* pois ele é incapaz de satisfazer simultaneamente as condições ditadas por todas as interações que o governam. Essa frustração introduz uma degenerescência no estado fundamental, que faz o sistema apresentar comportamentos complexos em temperaturas finitas [12]. Como um resultado dessa frustração, a magnetização da amostra se quebra em um padrão de domínios mesoscópicos com magnetização alternada, dando origem às fases moduladas. A morfologia das fases de equilíbrio é determinada por diversos fatores, como a força relativa das interações, a temperatura, os materiais e as condições de preparação da amostra [13, 11, 14].

A baixa dimensionalidade dos filmes ultrafinos torna os efeitos de borda/superfície especialmente fortes, pois a modificação do número de vizinhos nos átomos da superfície introduz uma forte *anisotropia uniaxial* nesses sistemas. Um sistema anisotrópico apresenta diferentes propriedades físicas dependendo da direção de medição. A anisotropia uniaxial favorece uma orientação dos spins perpendicular ao plano do filme, competindo com a interação dipolar, que favorece uma orientação dos spins paralela ao plano do filme. Essa competição dá origem ao fenômeno da “transição de reorientação dos spins”, denotada como SRT (do inglês, *spin reorientation transition*), onde a orientação preferencial dos spins muda de perpendicular a paralela ao plano com a variação da temperatura (ou espessura) do filme. Tipicamente, a magnetização é perpendicular ao filme a baixas temperaturas, e a transição de reorientação ocorre em uma temperatura finita, acima da qual a magnetização se alinha no plano do filme [2], como se pode ver na figura 3.

A transição de reorientação dos spins já foi observada em diversos estudos experimentais com filmes magnéticos ultrafinos [16, 15, 17, 18]. Se o filme for suficientemente fino, a anisotropia superficial força os momentos magnéticos da amostra a se orientarem perpendicularmente ao plano. Alguns experimentos mostram que a anisotropia superficial de uma monocamada de Fe ( $\sim 0.4\text{meV}/\text{átomo}$ ) pode ser até 100 vezes maior que o valor *bulk* ( $\sim 4\mu\text{eV}/\text{átomo}$ ) [19]. A transição de reorientação dos spins pode ou não estar presente nos filmes magnéticos ultrafinos, dependendo da composição e das condições de preparação do filme. Neste trabalho estamos interessados em estudar o caso em que a magnetização é perpendicular ao plano do filme, independente da ocorrência da transição de reorientação.

Esses estudos experimentais mostram algumas das principais características que os modelos teóricos de filmes magnéticos ultrafinos devem apresentar: a anisotropia

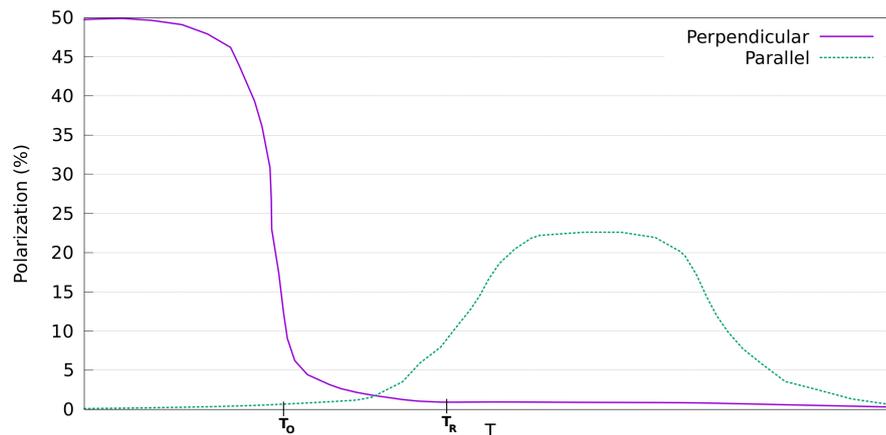


Figura 3 – Representação esquemática da magnetização perpendicular ao plano do filme ( $T < T_O$ , linha contínua) e paralela ao plano do filme ( $T > T_R$ , linha tracejada) observada por Pappas e coautores (1990). Fonte: figura adaptada de [15].

superficial, necessária para produzir estados ordenados em sistemas bidimensionais, e a presença de interações competitivas de curto e longo alcance, responsáveis pela formação das fases moduladas. Em especial, nos casos em que a anisotropia superficial é muito maior que a anisotropia da interação dipolar (*limite ultrafino*), podemos modelar os momentos magnéticos do sistema como variáveis de Ising, que podem assumir apenas duas orientações perpendiculares ao plano: *spin up* e *spin down*. Isso nos permite introduzir um modelo simples para os filmes magnéticos ultrafinos, o modelo *Ising dipolar*, o objeto de estudo dessa dissertação, que será abordado na seção 2.2.

As fases moduladas de faixas observadas experimentalmente mostram diferentes tipos de ordenamentos. Em um deles, geralmente a temperaturas mais baixas, as faixas podem estar orientadas todas em uma mesma direção, formando uma estrutura análoga à fase esmética em cristais líquidos (Fig. 4(a)). Em outro, a temperaturas mais altas, as faixas podem estar desorganizadas como em um líquido (Fig. 4(c)). É possível observar nos resultados experimentais situações em que as faixas apresentam uma ordem intermediária onde as faixas estão localmente orientadas, mas essa orientação apresenta variações em torno da média para maiores distâncias (Fig. 4(b)). Esse tipo de ordenamento intermediário é análogo a um cristal líquido nemático e é um dos objetos de estudo dessa dissertação.

## 2.2 Modelo Microscópico: Ising Dipolar

Em uma primeira aproximação, podemos modelar um corpo magnético como uma coleção (*ensemble*) de momentos magnéticos (spins) arranjados em uma rede - que neste trabalho será bidimensional e quadrada de lado  $L$ , contendo  $N = L^2$  spins. A configuração magnética de um corpo é governada pelo efeito recíproco de diversas interações, e apesar de o mecanismo completo para a formação de domínios magnéticos

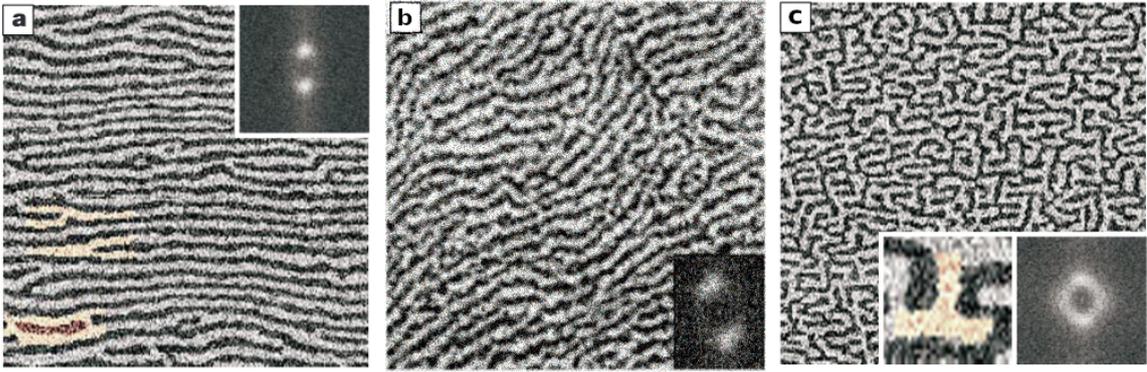


Figura 4 – Imagens de microscopia eletrônica de varredura com análise de polarização das fases (a) esmética, (b) nemática e (c) líquido-tetragonal em filmes magnéticos ultrafinos de Fe(fcc)/Cu(001). (a) Fase esmética com  $T = 293$  K e espessura de 2.44 ML apresentando várias dislocações; em detalhe o fator de estrutura. (b) Fase nemática com  $T = 300$  K e espessura de 2.6 ML; em detalhe o fator de estrutura. (c) Fase líquido-tetragonal (desordenada) à mesma temperatura, mas com espessura de 2.19 ML; em detalhe o fator de estrutura e uma disclinação. Fonte: figuras (a) e (c) adaptadas de [11]; figura (b) adaptada de [13].

ser muito complexo, podemos compreender seus princípios através de uma abordagem fenomenológica considerando apenas algumas poucas energias relevantes: a energia de troca  $E_{ex}$ , a energia dipolar  $E_{dip}$  e a energia de anisotropia  $E_{an}$  [2, 14]. Em geral, poderíamos incluir também a energia de interação com um campo magnético externo, mas neste trabalho estudaremos apenas os casos com campos externos nulos.

### 2.2.1 Energias Relevantes

Inicialmente vamos considerar um modelo onde cada spin  $\vec{S}_i$  pode assumir qualquer orientação no espaço - a orientação de cada spin sendo determinada em termos dos ângulos polares e azimutais ( $0 \leq \theta_i \leq \pi, 0 \leq \varphi_i \leq 2\pi$ ). Esse modelo é conhecido como “modelo clássico de Heisenberg”, onde o termo “clássico” se refere ao fato de as variáveis de spin  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  serem tratadas como vetores tridimensionais clássicos, e não como operadores em um espaço de Hilbert [20, 14].

#### Energia de Troca

A interação de troca surge como uma consequência da anti-simetrização da função de onda devido ao princípio de exclusão de Pauli. Ela surge sempre que há a sobreposição das funções de onda de elétrons vizinhos. Essa sobreposição diminui rapidamente com o aumento da distância entre os elétrons, atribuindo um caráter de curto alcance à interação. Essa interação pode ser descrita matematicamente como:

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

onde  $J$  é o parâmetro da interação de troca e  $\vec{S}_i$  representa o spin associado ao  $i$ -ésimo sítio da rede. A soma  $\langle i, j \rangle$  é realizada sobre todos os pares de primeiros vizinhos da rede.

Essa energia é responsável pelo ordenamento ferromagnético (ou antiferromagnético) nos materiais. Note que ela é independente da direção em que os spins estão alinhados; em outras palavras, a interação de troca é isotrópica. Se  $J > 0$ , a energia de troca é minimizada quando os spins  $\vec{S}_i$  apontam todos na mesma direção, resultando em estados ferromagnéticos ordenados (ver figura 6(a)); se  $J < 0$ , essa minimização ocorre quando cada  $\vec{S}_i$  se encontra anti-alinhado com seus primeiros vizinhos, resultando em estados antiferromagnéticos ordenados<sup>1</sup> (ver figura 6(b)). No presente trabalho, estamos interessados no caso em que a interação de troca é ferromagnética e compete com a interação dipolar, definida a seguir.

### Energia Dipolar

A energia dipolar de um corpo se deve à interação dos momentos magnéticos individuais com o campo magnético criado pelos demais momentos magnéticos do corpo. Ela também é conhecida como energia magnetostática ou energia de forma, pois depende da forma/geometria da amostra. O decaimento lento com a distância atribui à interação dipolar um caráter de longo alcance, que possui papel essencial na determinação das propriedades magnéticas do material e na morfologia dos estados ordenados. Essa energia também é responsável pela formação dos domínios magnéticos. Ela pode ser representada matematicamente como:

$$\mathcal{H}_{dip} = g \sum_{(i,j)} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right], \quad (2.2)$$

onde  $g > 0$  denota o parâmetro da interação dipolar,  $\vec{r}_i$  é a posição do spin  $\vec{S}_i$ , e  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  é a distância entre os spins  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  em unidades da rede cristalina. A soma  $(i, j)$  é realizada sobre todos os pares distintos de spins. O primeiro termo possui caráter antiferromagnético, favorecendo o anti-alinhamento entre pares de spins e competindo com a interação de troca ferromagnética. O segundo termo introduz uma anisotropia que favorece a orientação dos spins no plano da rede; por esse motivo a interação dipolar é anisotrópica, ao contrário da interação de troca.

A anisotropia da interação dipolar surge como uma consequência do “princípio de evitação de polos”: a interação dipolar tenta de todo jeito evitar polos livres no sistema [14]. O sistema pode evitar esses polos livres produzindo configurações de magnetização

<sup>1</sup> A formação de estados antiferromagnéticos ordenados depende crucialmente da rede subjacente: sua formação é possível na rede quadrada, mas não na rede triangular, onde é impossível encontrar uma configuração em que todos os spins estão anti-alinhados com seus primeiros vizinhos - fenômeno conhecido como “frustração geométrica”.

uniforme ou dividindo a magnetização em domínios. Por conta disso, a energia dipolar de um filme magnético ultrafino é minimizada quando todos os spins são paralelos entre si e possuem orientação paralela ao plano do filme (Fig. 5(a)). Quando os spins são perpendiculares ao plano do filme (Fig. 5(b)), a energia dipolar é maximizada. Isso significa que a energia dipolar causa um plano fácil de magnetização (o plano do filme) e um eixo difícil de magnetização (perpendicular ao plano do filme). Essa anisotropia faz com que a configuração do estado fundamental dependa da orientação espacial dos momentos magnéticos. Além disso, ela compete com a anisotropia superficial, que favorece o ordenamento perpendicular ao plano, definida a seguir.

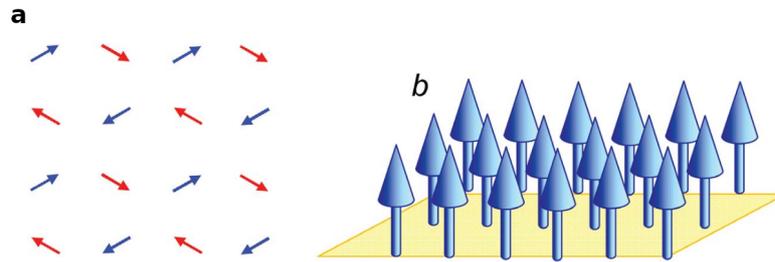


Figura 5 – Ilustração das configurações de magnetização que (a) minimizam e (b) maximizam a energia dipolar. Fonte: figuras adaptadas de [14].

### Energia de Anisotropia de Superfície

A anisotropia de superfície (ou anisotropia magnetocristalina) está relacionada com o acoplamento spin-órbita, devido ao campo cristalino criado pelos átomos em cada ponto da rede. Esse acoplamento introduz “correlações” entre os orbitais eletrônicos e o spin eletrônico, de modo que os orbitais acompanham o comportamento do spin quando ocorrem mudanças na magnetização do sistema [21]. A energia de anisotropia de superfície se deve à quebra de simetria da rede cristalina por conta do número reduzido de vizinhos que os sistemas apresentam na superfície (o número de vizinhos é menor do que o sistema apresenta no *bulk*) [22]. A anisotropia de superfície reproduz as simetrias da rede, como eixos e planos de simetria, que por sua vez determinam *eixos/planos fáceis* para a magnetização: a energia de anisotropia é minimizada quando os momentos magnéticos do sistema se orientam ao longo desses eixos/planos fáceis. Em outras palavras, a anisotropia de superfície favorece determinadas direções ou planos de magnetização. Ela pode ser representada matematicamente como:

$$\mathcal{H}_{an} = -K \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2. \quad (2.3)$$

Em geral, essa anisotropia favorece orientações paralelas ou perpendiculares ao plano, dependendo dos elementos utilizados e das condições de preparação da amostra. Nos sistemas em que estamos interessados, a anisotropia de superfície é *uniaxial* e determina um

eixo fácil na direção *perpendicular* ao plano do filme ( $K > 0$ ). Nesses casos, a anisotropia superficial compete com o termo anisotrópico da interação dipolar (2.2), que favorece a orientação paralela ao plano do filme, dando origem à transição de reorientação dos spins mencionada na seção 2.1.

Para facilitar os cálculos, é comum reescalarmos as interações pelo fator  $g$ , de modo que o Hamiltoniano completo  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_{dip} + \mathcal{H}_{an}$  toma a forma:

$$\mathcal{H} = -\delta \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{(i,j)} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] - \eta \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2, \quad (2.4)$$

onde  $\delta = J/g$  e  $\eta = K/g$ .

## 2.2.2 Limite Ultrafino: Alta Anisotropia de Superfície

Vários filmes magnéticos ultrafinos, como Fe/Cu(100), Co/Au(111), Fe/Ag(001) e Co/Au(111) apresentam magnetizações na direção perpendicular ao plano do filme [13, 14]. Esse efeito se deve à competição entre as anisotropias de superfície e da interação dipolar, que favorecem orientações perpendiculares e paralelas ao plano do filme, respectivamente. Quando o filme magnético é suficientemente fino, a anisotropia superficial supera a anisotropia da interação dipolar, determinando um eixo fácil ( $z$ ) perpendicular ao plano do filme - o chamado *limite ultrafino*. Nesse limite, podemos escrever as variáveis de spin como  $\vec{S}_i = (0, 0, S_i^z)$ , e em coordenadas esféricas temos  $S_i^z = \cos \theta$ , onde  $\theta$  representa o ângulo entre o spin  $\vec{S}_i$  e o eixo fácil. A energia de anisotropia (2.3) então é minimizada quando  $\theta = 0$  ou  $\theta = \pi$ , isto é, quando o spin está alinhado ou anti-alinhado com o eixo fácil perpendicular ao plano do filme.

No modelo microscópico, a anisotropia superficial tem o papel de restringir as possíveis orientações dos momentos magnéticos do sistema àquelas que correspondem aos eixos/planos fáceis de magnetização. Isso nos permite substituir as variáveis de Heisenberg, representadas por vetores tridimensionais clássicos  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ , por variáveis escalares de Ising  $S_i \equiv (0, 0, S_i^z)$  que podem assumir apenas dois valores:  $S_i = +1$  (*spin up*), ou  $S_i = -1$  (*spin down*). Nesse caso, a componente da interação dipolar (2.2) que favorece orientações paralelas ao plano é identicamente nula, pois os spins perpendiculares ao plano da rede satisfazem a relação  $\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij} = 0$ , restando apenas a contribuição antiferromagnética. Desse modo, a interação dipolar entre spins de Ising corresponde a uma interação antiferromagnética de longo alcance [14], e o Hamiltoniano (2.4) se reduz ao modelo de *Ising dipolar*, o principal objeto de estudo do presente trabalho:

$$\mathcal{H} = -\delta \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \sum_{(i,j)} \frac{S_i S_j}{r_{ij}^3}, \quad (2.5)$$

onde  $\delta = J/g$  denota a razão entre as constantes de troca  $J > 0$  e dipolar  $g > 0$ ; a primeira soma  $\langle i, j \rangle$  é feita sobre todos pares de primeiros vizinhos, a segunda soma  $(i, j)$  é feita

sobre todos os pares distintos de spins, e  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  é a distância entre os spins  $S_i$  e  $S_j$  em unidades da rede cristalina. A energia é medida em unidades de  $g$ .

### 2.2.3 Estado Fundamental

O estado fundamental do modelo de Ising apenas com interações ferromagnéticas de troca é o ferromagneto simples, com todos os spins apontando na mesma direção - configuração também chamada de monodomínio (Fig. 6(a)). Por outro lado, o estado fundamental de um modelo de Ising apenas com interações dipolares (antiferromagnéticas) é uma configuração antiferromagnética (Fig. 6(b)), onde cada spin se encontra anti-alinhado com seus primeiros vizinhos [14]. Na presença de ambas as interações, em geral, os estados ferromagnéticos e antiferromagnéticos não são configurações que minimizam a energia total (2.5), e o sistema apresenta o fenômeno de frustração [2].

Vários filmes magnéticos ultrafinos apresentam magnetizações perpendiculares ao plano do filme. No entanto, uma configuração de magnetização uniforme (Fig. 5(b)), apesar de minimizar a energia de troca, maximiza a energia dipolar. Essa energia dipolar é reduzida quando a amostra se separa em domínios de magnetização oposta. A presença desses domínios aumenta o comprimento das paredes de domínio, resultando num aumento da energia de troca (pois nas paredes de domínio os spins estão anti-alinhados). O custo em energia de troca devido à formação das paredes de domínio é compensado por uma redução da energia dipolar de toda a amostra. No interior de cada domínio, temos regiões homogêneas em que todos os spins apontam na mesma direção, minimizando a interação de troca localmente; nas interfaces entre domínios, a energia de troca não é minimizada, mas a energia dipolar é satisfeita. Essa é a competição entre as interações de troca e dipolar que dá origem às fases moduladas de faixas [14].

A interação dipolar favorece o alinhamento antiferromagnético dos spins para evitar descompensações na magnetização. Assim, mesmo que algumas partes da amostra sejam desfavoráveis para a interação dipolar, a energia dipolar pode ser minimizada permitindo que a carga magnética total da amostra seja zero. Isso significa que a área total de domínios com orientações *up* e *down* devem ser iguais. Por conta disso, dois possíveis estados fundamentais foram sugeridos: (1) um padrão de faixas paralelas de magnetização alternada com largura  $h$  [23, 24, 25, 26]; e (2) um padrão de domínios quadrados de magnetização alternada com tamanho linear  $h$ , tipo “tabuleiro de xadrez” (*checkerboard*), com as paredes de domínios apresentando orientações paralelas aos lados da rede subjacente [27].

Diversos estudos, especialmente os cálculos da energia do estado fundamental [25, 26] e simulações de Monte Carlo [28, 26, 29, 30, 8], mostram que o sistema apresenta um estado de faixas a baixas temperaturas. A estabilidade dos domínios de faixas se deve ao fato de que, para um dado valor de  $h$  (largura das faixas ou tamanho linear dos

domínios quadrados), o comprimento total das paredes de domínio de uma configuração *checkerboard* é maior que das configurações de faixas. Por conta disso, a energia de troca - que é geralmente muito maior que a energia dipolar - é menor em um estado de faixas do que em um estado *checkerboard*, corroborando a hipótese de que o estado fundamental corresponde a uma fase de faixas [14].

A prova matemática formal de que o estado fundamental é o estado de faixas foi apresentada no trabalho de Giuliani, Lebowitz e Lieb (2007) [31], onde foi demonstrado que sistemas bidimensionais discretos de momentos magnéticos em um plano, sujeitos às interações de troca ferromagnética entre primeiros vizinhos e dipolar de longo alcance possuem estados fundamentais de faixas periódicas (Figs. 6(c) e 6(d)), e que o estado ferromagnético de monodomínio nunca é o estado fundamental desses sistemas.

Vários resultados importantes sobre a estrutura do estado fundamental do modelo Ising dipolar (2.5) foram obtidos através de simulações de Monte Carlo - geralmente na rede quadrada com condições de contorno periódicas. Dentre esses resultados, destacamos aqueles de MacIsaac e coautores (1995) [26], que evidenciam a dependência do estado fundamental com a razão entre as interações de troca e dipolar  $\delta = J/g$ : o estado fundamental é uma fase de faixas para  $\delta > \delta_c \approx 0.425$ ; para  $\delta < \delta_c$ , o estado fundamental é antiferromagnético; para  $\delta > \delta_c$ , o estado fundamental é composto por faixas de magnetização alternada com largura  $h$ , e a largura das faixas depende de  $\delta$ . Além disso, no limite  $h \gg 1$ , a largura das faixas cresce exponencialmente com  $\delta$ ,  $h(\delta) \sim e^{\delta/2}$ .

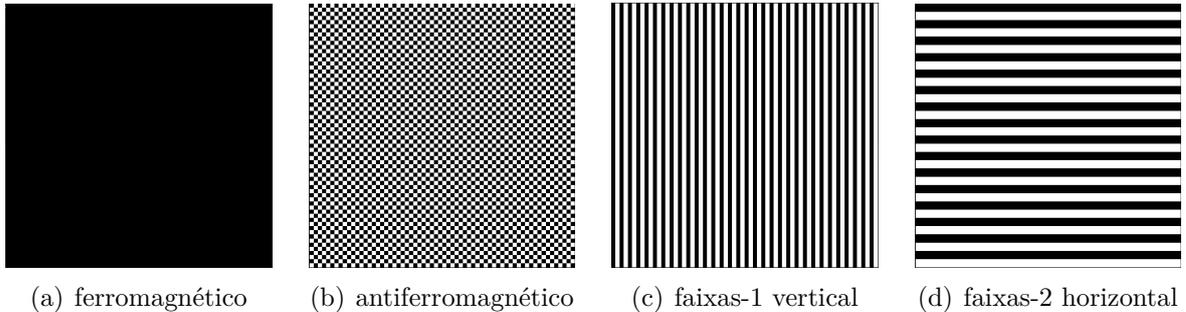


Figura 6 – Ilustração de alguns dos possíveis estados fundamentais do modelo *Ising dipolar* (2.5). Configurações extraídas das nossas simulações de Monte Carlo do modelo com  $L = 64$  e (a)  $\delta \gg 1$ ,  $h > L$ ; (b)  $\delta < 0.425$ ; (c)  $\delta = 1$ ; (d)  $\delta = 2$ . O estado ferromagnético (a) nunca é o estado fundamental do sistema [31], e essa configuração ilustra um efeito do tamanho finito das simulações, quando a largura das faixas  $h$  é maior que o tamanho linear do sistema simulado  $L$ , devido ao crescimento exponencial da largura das faixas com o valor de  $\delta$ .

## 2.2.4 Propriedades de Temperatura Finita

Como vimos na seção 2.2.3, o estado fundamental do modelo *Ising dipolar* (2.5) é um estado antiferromagnético para  $\delta < 0.425$ , e para  $\delta > 0.425$  é um estado de

faixas de magnetização alternada com uma largura  $h(\delta)$  que depende da razão entre os parâmetros de troca e dipolar  $\delta = J/g$ . Os estados de faixas (Figs. 6(c) e 6(d)) apresentam tanto ordem orientacional quanto posicional. A ordem orientacional está relacionada à invariância desses estados sob rotações de  $\pm\pi$ . A ordem posicional está relacionada à invariância sob translações paralelas e perpendiculares às faixas. Qualquer translação paralela satisfaz essa invariância, mas as translações perpendiculares só a satisfazem quando o comprimento corresponde a um múltiplo inteiro do período de modulação  $2h$ . Esse tipo de ordem posicional pode ser chamada de *ordem translacional anisotrópica* [32]. O estado fundamental de faixas é um caso particular de um sólido bidimensional com periodicidade unidimensional.

O percurso feito por um sistema bidimensional ordenado em direção a um estado isotrópico de altas temperaturas já foi alvo de diversos estudos e constitui um problema clássico da teoria de fusão bidimensional [6]. Algumas teorias enfatizam o papel dos defeitos topológicos e sugerem um processo de múltiplas etapas, com a presença de fases intermediárias e transições de fase de segunda ordem [33, 34, 35, 36]. Outras teorias preveem uma transição direta de primeira ordem [5, 23, 30].

O grau de ordenamento em um sistema pode ser quantificado através dos parâmetros de ordem. O parâmetro de ordem, conforme introduzido por Landau (1937) [37], é um parâmetro  $\phi$  que permite distinguir as fases simétricas ( $\phi = 0$ ) das fases com simetria quebrada ( $\phi \neq 0$ ). No caso de sistemas formadores de padrões, o parâmetro de ordem pode ser definido como um campo  $\phi(\vec{r})$  que descreve o sistema ponto a ponto. Em geral, esse campo é contínuo e bem definido, exceto em alguns pontos singulares. Os defeitos topológicos são singularidades no espaço do parâmetro de ordem. A topologia e as simetrias do espaço do parâmetro de ordem determinam os tipos de defeitos topológicos que podem ocorrer em um sistema. De acordo com algumas teorias - em especial, a teoria KTHNY - esses defeitos possuem um papel importante na fusão de sistemas bidimensionais [33, 34, 35, 36].

Nos sistemas que formam faixas, dois tipos de defeitos topológicos são relevantes: as dislocações (*dislocations*) e disclinações (*disclinations*) [4], que podem ser visualizados na figura 7. Uma dislocação consiste no término de uma faixa e uma distorção correspondente das faixas em seu redor. Uma disclinação é o ponto em que duas fronteiras separando regiões em que as faixas estão orientadas em direções diferentes se encontram e terminam. As dislocações são defeitos da ordem posicional, enquanto que as disclinações são defeitos da ordem orientacional [2].

A teoria KTHNY - que leva as iniciais de Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson e Young [33, 38, 34, 35] - descreve o processo de fusão em cristais bidimensionais através de transições mediadas por defeitos topológicos. Essa teoria foi estendida para sistemas de cristais líquidos esméticos bidimensionais na ausência de um substrato por Toner e

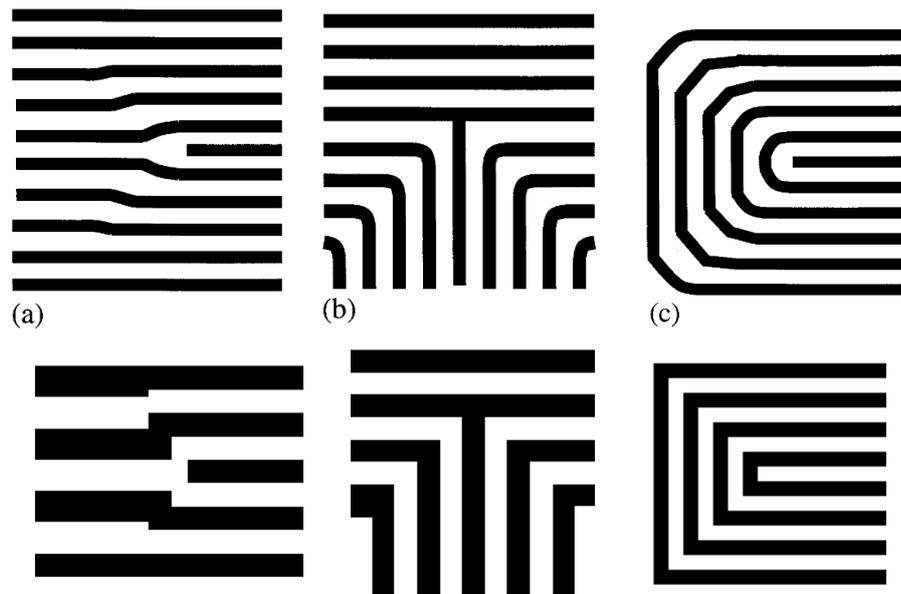


Figura 7 – Acima, representação esquemática dos tipos de (a) dislocação e (b,c) disclinações que podem ocorrer na fase de faixas. Fonte: [2]. Abaixo, os mesmos defeitos, extraídos de configurações dos spins das nossas simulações de Monte Carlo do Hamiltoniano (2.5).

Nelson (1981) [36]. De acordo com a teoria KTHNY, a baixas temperaturas, o sólido bidimensional possui ordem orientacional de longo alcance e uma ordem posicional de quase-longo alcance, que decai algebricamente com a distância. Essa fase *esmética* pode conter pares ligados de dislocações com cargas topológicas opostas. Com o aumento da temperatura, o sistema sofre um processo de dissociação de dislocações, que destroem a ordem posicional, resultando em uma fase *nemática*, com ordem orientacional de longo alcance, mas com ordem posicional decaindo exponencialmente com a distância. A fase nemática contém dislocações, que podem ser vistas como pares ligados de disclinações com cargas topológicas opostas. Com o aumento da temperatura, ocorre uma dissociação de disclinações, que destroem a ordem orientacional, resultando na fase líquida, onde as correlações posicionais e orientacionais decaem exponencialmente com a distância.

Ao considerar o efeito de flutuações térmicas, Toner e Nelson (1981) [36] mostraram que as funções de correlação posicionais decaem exponencialmente a zero nas duas direções principais. Isso significa que a ordem posicional é de curto alcance a qualquer temperatura finita. Portanto, a fase esmética com ordem posicional de longo alcance é instável para qualquer temperatura finita devido às flutuações nas paredes de domínio; em outras palavras, a fase esmética só existe em  $T = 0$  K, e a qualquer temperatura finita ela se torna uma fase nemática, apenas com ordem orientacional de longo alcance. A temperaturas mais altas, a fase nemática sofre uma transição de dissociação de disclinações, que destroem a ordem orientacional do sistema, resultando na fase isotrópica (Fig. 8). A fase esmética pode ser tornar estável a temperaturas finitas quando são considerados efeitos do substrato

[36, 39, 4].

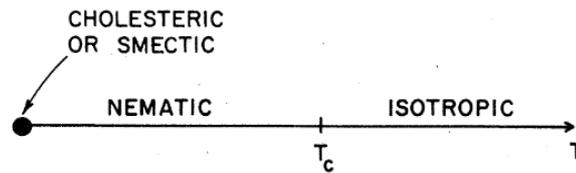


Figura 8 – Fase esmética estável apenas para  $T = 0$  K, tornando-se uma fase nemática para qualquer temperatura finita devido às flutuações das paredes de domínio. Com o aumento da temperatura, a fase nemática passa à fase isotrópica em  $T_c$  através de uma transição de dissociação de disclinações. Fonte: [36].

A teoria de Toner e Nelson (1981) [36] foi aplicada ao caso dos filmes magnéticos ultrafinos com anisotropia perpendicular, considerando o efeito de uma anisotropia cristalina com simetria tetragonal devido ao substrato. Esse trabalho foi realizado por Kashuba e Pokrovsky (1993) [39] e Abanov e coautores (1995) [4]. Esses autores mostraram que a fase esmética se torna estável para temperaturas finitas, utilizando uma aproximação elástica em que as constantes elásticas de compressão e flexão das faixas são determinadas em função das intensidades das interações magnéticas relevantes. Esses autores identificaram três fases com diferentes tipos de ordem:

1. A *fase de faixas* surge a baixas temperaturas, com os domínios de faixas formando uma espécie de “cristal líquido esmético” orientado, onde a anisotropia tetragonal favorece apenas duas direções mutuamente perpendiculares. Nessa fase, a ordem posicional é de quase-longo alcance (possui decaimento algébrico com a distância), enquanto que a ordem orientacional é de longo alcance. Essa fase suporta a presença de pares ligados de dislocações com cargas topológicas opostas, que possuem energia finita - ao contrário de uma dislocação livre.
2. A *fase Ising nemática* surge a temperaturas intermediárias, sendo caracterizada por uma ordem posicional de curto alcance e uma ordem orientacional de longo alcance. Partindo da fase de faixas, com o aumento da temperatura, as dislocações livres começam a se proliferar, destruindo a ordem posicional do sistema em uma transição de dissociação de dislocações do tipo KT. A ordem orientacional de longo alcance é preservada nessa transição. Essa fase nemática suporta a presença de pares ligados de disclinações com cargas topológicas opostas.
3. A *fase líquido-tetragonal* surge em altas temperaturas, sendo caracterizada por ordens posicional e orientacional de curto alcance. Com o aumento da temperatura a partir da fase nemática, ocorre a proliferação de “paredes de domínio de rotação de faixas”, que destroem a ordem orientacional do sistema em uma transição de segunda ordem

da classe de universalidade de Ising [38, 34]. O líquido resultante dessa transição não é isotrópico, e o termo “tetragonal” se aplica pois o substrato fornece uma anisotropia que favorece apenas duas direções mutuamente perpendiculares das faixas.

Levando em conta os efeitos do substrato com simetria tetragonal, Abanov e coautores (1995) [4] sugeriram dois possíveis cenários de desordenamento. No primeiro cenário, o sistema é incapaz de sustentar a fase nemática e passa direto da fase esmética à fase líquido-tetragonal por uma transição de primeira ordem. No segundo cenário, temos um processo de duas etapas: a fase esmética passa à fase nemática por uma transição do tipo KT de dissociação de dislocações, que destroem a ordem posicional algébrica, mas a anisotropia tetragonal estabiliza a ordem orientacional de longo alcance; em seguida, a ordem orientacional da fase nemática é destruída pela proliferação de “paredes de domínio de rotação de faixas” em uma transição de segunda ordem da classe de universalidade de Ising, resultando na fase líquido-tetragonal.

## 2.3 Aproximação de Campo Médio

Nesta seção, revisamos as propriedades do modelo Ising dipolar na aproximação de campo médio estudada por Pighín e Cannas [9, 40], que permitem analisar as soluções de faixas a baixas temperaturas. Para realizar os cálculos de campo médio, é conveniente reescrever o Hamiltoniano (2.5) na forma:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j, \quad (2.6)$$

com

$$J_{ij} = \begin{cases} \delta - 1, & i \text{ e } j \text{ primeiros vizinhos} \\ 0, & i = j \\ -\frac{1}{r_{ij}^3}, & \text{outros casos} \end{cases} \quad (2.7)$$

A energia livre por partícula na aproximação de campo médio variacional tem a forma [41]

$$f_{MF} = \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle_\rho + \frac{1}{\beta N} \langle \ln \rho \rangle_\rho, \quad (2.8)$$

onde  $N = L^2$  é o tamanho do sistema,  $\beta = 1/k_B T$  com a constante de Boltzmann  $k_B = 1$ , e as médias  $\langle \dots \rangle_\rho$  são tomadas com respeito a uma distribuição de probabilidades de spins independentes:

$$\rho\{S_i\} = \prod_{i=1}^N \rho_i(S_i). \quad (2.9)$$

As variáveis  $\rho_i(S_i)$  representam as densidades de probabilidade em cada sítio, e estão sujeitas aos vínculos:

$$\sum_{S_i=\pm 1} \rho_i = 1 \quad (2.10)$$

e

$$\sum_{S_i=\pm 1} S_i \rho_i = m_i \quad (2.11)$$

onde  $m_i$  são os parâmetros de ordem de cada sítio, a serem determinados variacionalmente. Propondo uma densidade de probabilidade da forma  $\rho_i(S) = a + bS$  e utilizando os vínculos (2.10) e (2.11), obtemos:

$$\rho_i(S) = \frac{1 + m_i S}{2}. \quad (2.12)$$

Substituindo (2.12) na energia livre (2.8), obtemos:

$$f_{MF}\{m_i\} = -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j + \frac{1}{2\beta N} \sum_i \{(1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i)\}. \quad (2.13)$$

Impondo a condição de minimização  $\frac{\partial f_{MF}}{\partial m_i} = 0$  na equação (2.13), obtemos as equações de estado de campo médio:

$$m_i = \tanh \left( \beta \sum_j J_{ij} m_j \right), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.14)$$

As equações de campo médio formam um sistema de  $N$  equações não-lineares acopladas, e suas soluções determinam os mínimos da energia livre (2.13). Para  $T > T_c$ , a única solução é um estado paramagnético desordenado. Para  $T < T_c$ , as soluções podem ser calculadas numericamente, introduzindo determinados *ansatz* para as soluções - por exemplo, propondo soluções que partilhem simetrias com determinados estados fundamentais do modelo. Assumindo condições de contorno periódicas, podemos introduzir as transformadas de Fourier:

$$m_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \hat{m}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}, \quad (2.15)$$

e então a interação (2.7) pode ser reescrita em termos dos vetores de onda como:

$$\hat{J}(\vec{k}) = 2\delta(\cos k_x + \cos k_y) - \sum_i \frac{1}{r_{ij}^3} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}), \quad (2.16)$$

onde  $\vec{r}_i$  é o vetor posição do  $i$ -ésimo sítio e  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ . Para garantir que os parâmetros variacionais  $m_i$  sejam reais, devemos ter  $\hat{m}_{-\vec{k}} = \hat{m}_{\vec{k}}^*$ . Os vetores de onda  $\vec{k}$  estão restritos à primeira zona de Brillouin:

$$k_j = \frac{2\pi n_j}{L}, \quad \text{com } n_j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \left( \frac{L}{2} - 1 \right), \frac{L}{2}. \quad (2.17)$$

Expandindo os logaritmos da expressão (2.13) em séries de Taylor para  $m_i \approx 0$ , temos:

$$\sum_i [(1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i)] = \sum_i \left[ \frac{m_i^2}{2} + \sum_{j=2}^{\infty} \left( \frac{1}{2j-1} - \frac{1}{2j} \right) m_i^{2j} \right], \quad (2.18)$$

e substituindo as expressões (2.15), (2.16) e (2.18) em (2.13), obtemos:

$$f_{MF} = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} [T - \hat{J}(\vec{k})] |\hat{m}_{\vec{k}}|^2 + \frac{1}{2\beta N} \sum_i \sum_{j=2}^{\infty} \left( \frac{1}{2j-1} - \frac{1}{2j} \right) m_i^{2j}, \quad (2.19)$$

que possui a forma de uma expansão de Landau. Vale ressaltar que a expansão contém apenas potências pares de  $m_i$ , consistente com a simetria de inversão ( $s_i \rightarrow -s_i \quad \forall i$ ) que o sistema possui devido à ausência de um campo magnético externo. Os coeficientes pares com  $j \geq 2$  são todos positivos, pois  $[1/(2j-1) - 1/2j] > 0$  para  $j \geq 2$ . O coeficiente de segunda ordem muda de sinal com a temperatura: conforme a temperatura é reduzida, o primeiro coeficiente quadrático a ficar negativo é o coeficiente que corresponde ao máximo de  $\hat{J}(\vec{k})$ . A partir dessa expansão de Landau, pode-se concluir que há uma transição de fase de segunda ordem entre uma fase paramagnética desordenada ( $\hat{m}_{\vec{k}} = 0, \quad \forall \vec{k}$ ) e uma fase ordenada ( $\hat{m}_{\vec{k}_{max}} \neq 0$ ), e essa transição se dá na temperatura crítica:

$$T_c = \max_{\vec{k}} \hat{J}(\vec{k}). \quad (2.20)$$

Essa equação pode ser resolvida numericamente para obter a temperatura crítica  $T_c(\delta)$ . Utilizando as transformadas de Fourier (2.15) e (2.16), as equações de campo médio (2.14) tomam a forma:

$$m_i = \tanh \left( \frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \hat{m}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} \right), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.21)$$

As soluções numéricas da equação (2.21) foram analisadas por Pighín e Cannas (2007) [9] para  $T < T_c$  e  $0 < \delta \leq 4$ . Em especial, eles investigaram as soluções que possuem as mesmas simetrias dos estados fundamentais antiferromagnético (AF) e de faixas. Para esse fim, eles introduziram um *ansatz*: no caso de um estado antiferromagnético, as soluções de (2.21) devem satisfazer  $m_{(x,y)} = m_0(-1)^{x+y}$ ; no caso de um estado de faixas verticais de largura  $h$ , as soluções da equação (2.21) devem satisfazer  $m_{(x+h,y)} = -m_{(x,y)}, \quad \forall x, y$  e  $m_{(x,y)} = m_{(x,y')}, \quad \forall x, y, y'$ . No caso das faixas, as condições restringem os harmônicos da equação (2.15) àqueles que satisfazem

$$(k_x, k_y) = \left[ \pm(2l+1)\frac{\pi}{h}, 0 \right], \quad \text{com } l \in \mathbf{Z} \text{ tal que } 2l+1 \leq h. \quad (2.22)$$

Para  $h = 1$ , temos somente  $k_x = \pi$ ; para  $h = 2$ , temos  $k_x = \pm\pi/2$ ; para  $h = 3$ , temos  $k_x = \pm\pi/3, \pi$ , e assim por diante. Isto é, para uma solução de faixas de largura  $h$ , temos  $h$  amplitudes complexas independentes  $\hat{m}_{\vec{k}}$ . Para que as soluções sejam reais, devemos ter

$\hat{m}_{-\vec{k}} = \hat{m}_{\vec{k}}^*$ . Substituindo essas condições nas equações (2.15) e (2.19), obtemos um sistema de  $h$  equações não-lineares para as amplitudes  $\hat{m}_{\vec{k}}$  que pode ser resolvido numericamente.

Esses autores [9] calcularam as soluções de faixas na aproximação de campo médio para larguras  $h = 1, 2, \dots, 6$  para diversos valores de  $\delta$  e  $T < T_c$ . Analisando a estabilidade dessas soluções, eles observaram a existência de uma grande quantidade de estados metaestáveis na vizinhança da transição, que podem ser visualizados nas figuras 9(a) e 9(b).

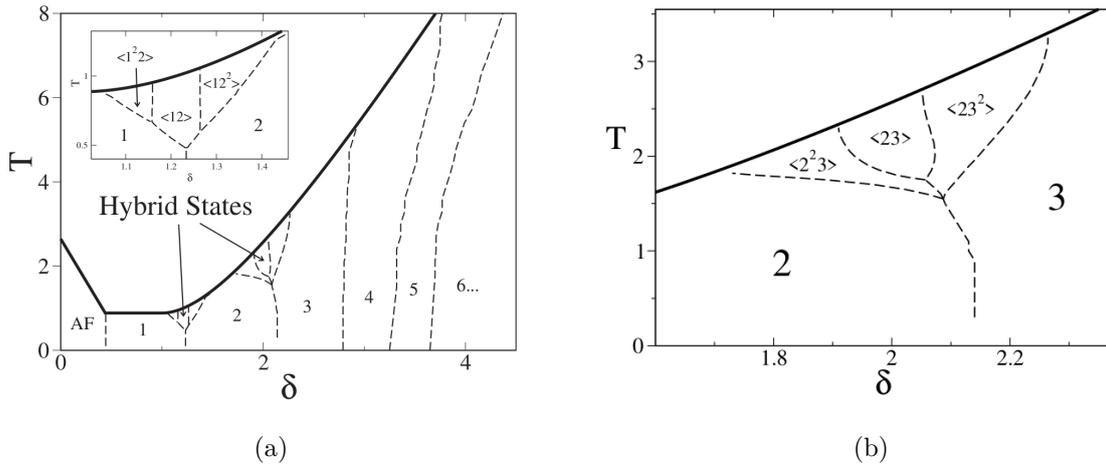


Figura 9 – (a) Diagrama de fases  $(\delta, T)$  de campo médio. Os números na região de baixas temperaturas indicam a largura  $h$  de equilíbrio das faixas de cada fase. A linha sólida corresponde à temperatura crítica  $T_c(\delta)$ . A linha tracejada corresponde a uma transição de primeira ordem entre as fases ordenadas. *Inset*: Zoom na região híbrida entre as faixas de largura  $h = 1$  e  $h = 2$ . (b) Zoom na região  $1.6 < \delta < 2.4$ . Fonte: [9].

Uma característica notável da análise de Pighín e Cannas (2007) [9] é a presença de regiões perto de  $T_c(\delta)$  onde não existem soluções de faixas - em seu lugar aparece um outro tipo de solução, composta por faixas ferromagnéticas paralelas de diferentes larguras. Os autores chamaram essas soluções de “estados híbridos”. Esses estados são denotados por  $\langle h_1^{n_1} h_2^{n_2} \dots h_l^{n_l} \rangle$  (seguindo a notação de Selke e Fisher para o modelo ANNNI [42]), e representam a repetição periódica de um padrão fundamental composto por  $n_1$  faixas de largura  $h_1$  (com orientações opostas), seguido por  $n_2$  faixas de largura  $h_2$ , e assim por diante (Fig. 10). As regiões de soluções com faixas puras e faixas híbridas podem ser vistas na figura 9(a). As faixas híbridas surgem entre as regiões de faixas puras para temperaturas próximas da transição  $T_c$ , e as linhas de transição se ramificam com o aumento da temperatura. Por exemplo, a transição entre os estados de faixas  $h = 1$  e faixas  $h = 2$  culmina em um ponto triplo com a aparição das faixas híbridas  $\langle 12 \rangle$ . Com o aumento da temperatura, a transição entre os estados  $h = 1$  e  $\langle 12 \rangle$  sofre uma nova bifurcação em um novo ponto triplo, e assim sucessivamente, com a aparição de uma

sucessão de pontos triplos separando fases de complexidade crescente [40].

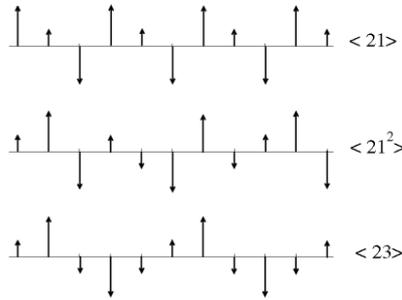


Figura 10 – Notação de Selke e Fisher para os estados híbridos. Fonte: [42, 9].

Na aproximação de campo médio, as transições entre estados de faixas de diferentes larguras são de primeira ordem - o que está de acordo com a existência de diversos estados metaestáveis no diagrama de fases. A transição entre as fases de faixas e a fase desordenada é de segunda ordem, não apresentando uma fase nemática intermediária (nem sendo uma transição direta de primeira ordem), em desacordo com os cenários previstos por Abanov e coautores [4]. Vale ressaltar que essa aproximação não consegue capturar os ordenamentos nemático e líquido-tetragonal, pois essas fases são caracterizadas por ausência de ordem posicional, e a única solução desordenada possível nessa aproximação é o estado paramagnético [9].

Um motivo por trás disso é o fato da aproximação de campo médio desprezar flutuações, que são particularmente fortes em duas dimensões, pois  $d = 2$  é a *dimensão crítica inferior* (dimensão abaixo da qual não ocorre transição de fase em temperatura finita), e  $d = 4$  é a *dimensão crítica superior* (dimensão acima da qual as flutuações não alteram os expoentes críticos de campo médio). Quando essas flutuações são desprezadas, são introduzidas mudanças qualitativas no comportamento crítico do modelo. Por esse motivo, é importante comparar as previsões de campo médio com aquelas obtidas através de outros métodos, como as simulações de Monte Carlo - discutidas em detalhe nas seções 2.4 e 3.1.

## 2.4 Simulações

O modelo *Ising dipolar* (2.5) foi alvo de extensas investigações desde a década de 1990. Apesar de constituir um modelo simples, a frustração devido à competição entre as interações de troca e dipolar dá origem a um diagrama de fases complexo, tornando o modelo interessante e desafiador de ser estudado. Diversas propriedades do diagrama de fases  $(\delta, T)$  foram elucidadas ao longo das últimas décadas, como a estrutura do estado fundamental (seção 2.2.3) e algumas propriedades de temperatura finita do modelo

(seção 2.2.4). Apesar desses esforços, a natureza da transição entre as fases de faixas e líquido-tetragonal ainda permanece uma questão em aberto. Um dos objetivos do presente trabalho é investigar e caracterizar essa transição.

As simulações de Monte Carlo do modelo *Ising dipolar* presentes na literatura revelam um diagrama de fases  $(\delta, T)$  complexo (Figs. 12, 13 e 14). A baixas temperaturas, o modelo apresenta *fases antiferromagnéticas* (AF) para  $0 < \delta < 0.4152$  (Fig. 11(a)). Para  $0.4152 < \delta < 0.4403$ , o modelo apresenta fases tipo “tabuleiro de xadrez irregular” (IRC, do inglês *irregular checkerboard*) com domínios retangulares de spins (Fig. 11(b)) [43, 44]. Para  $\delta > 0.4403$ , os estados consistem nas mesmas *fases de faixas* de magnetização alternada do estado fundamental, caracterizadas por uma largura  $h$  que cresce com  $\delta$  (Fig. 11(c)) [26]. Esses estados de faixas são denotados por  $h_1, h_2, \dots, h_n$  para faixas de largura  $h = 1, h = 2, \dots, h = n$ , respectivamente.

Com o aumento da temperatura, as fases ordenadas (AF, IRC,  $h_1, h_2$ , etc.) sofrem uma transição para a *fase líquido-tetragonal* (TL, Fig. 11(e)), que ainda é uma fase modulada de faixas com domínios bem definidos e simetria tetragonal, mas que não apresenta ordens posicional e orientacional [28]. Alguns autores reportaram a presença de uma *fase nemática* (Fig. 11(d)) entre as fases de faixas e líquido-tetragonal em uma faixa estreita de valores  $2 \leq \delta \leq 3.6$  [8, 9, 45, 44, 10]. Com o aumento da temperatura, a simetria tetragonal da fase líquido-tetragonal é gradualmente substituída por uma simetria rotacional completa, resultando na *fase paramagnética* completamente desordenada (Fig. 11(f)) [2].

O trabalho pioneiro na detecção da fase nemática nas simulações de Monte Carlo do modelo *Ising dipolar* foi um estudo feito por Cannas e coautores (2006) [8]. Esses autores mostraram que para sistemas suficientemente grandes ( $L \geq 40$ ), a transição entre as fases de faixas e líquido-tetragonal pode apresentar dois cenários distintos, dependendo do valor de  $\delta = J/g$ . No primeiro cenário ( $\delta = 1$ ), existe uma única transição de fase de primeira ordem fraca entre as fases de faixas e líquido-tetragonal. No segundo cenário ( $\delta = 2$ ), existem duas transições de fase em temperaturas distintas. A primeira transição ocorre em  $T_1 \approx 0.772$  e está associada à perda da ordem posicional da fase de faixas, resultando na fase nemática. A segunda transição ocorre em  $T_2 \approx 0.797$  e está associada à perda da ordem orientacional da fase nemática, resultando na fase líquido-tetragonal.

As simulações de Cannas e coautores (2006) [8] não puderam determinar definitivamente a natureza das transições faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal devido aos fortes efeitos de tamanho finito, mas eles sugeriram a possibilidade dessas transições serem do tipo KT, mediadas por defeitos topológicos [33]. A transição faixas-nemática estaria associada a um processo de dissociação de dislocações, enquanto que a transição nemática-líquido-tetragonal estaria associada à dissociação de disclinações. Esses resultados são consistentes com um dos cenários previstos por Abanov e coautores [4], de que a transição

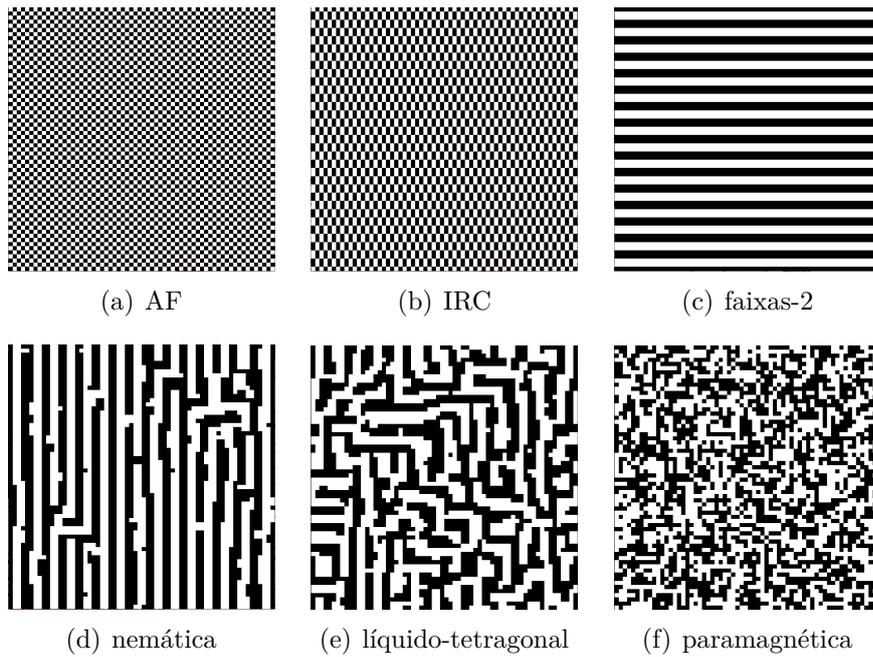


Figura 11 – Configurações de algumas das fases do modelo *Ising dipolar* (2.5) extraídas das nossas simulações de Monte Carlo com  $L = 64$  e (a)  $\delta = 0.35, T_a = 0.15$ ; (b)  $\delta = 0.43, T_b = 0.16$ ; (c,d,e,f)  $\delta = 2$  e temperaturas  $T_c = 0.65, T_d = 0.79, T_e = 0.9$  e  $T_f = 6.0$ .

entre as fases de faixas e líquido-tetragonal procede em duas etapas, com a presença de uma fase nemática intermediária apenas com ordem orientacional de longo alcance.

A fase nemática também foi detectada nas simulações de Monte Carlo de Pighín e Cannas (2007) [9]. Esses autores elaboraram um diagrama de fases  $(\delta, T)$  detalhado (Fig. 13), mostrando que nas regiões do diagrama de fases onde a aproximação de campo médio prevê estados de “faixas híbridas” (Fig. 9), as simulações apresentam fases nemáticas. Quanto ao comportamento de baixas temperaturas, tanto a aproximação de campo médio quanto as simulações de Monte Carlo preveem a existência de um número crescente de estados metaestáveis com o aumento de  $\delta$ , o que dificulta a termalização dos sistemas a baixas temperaturas [29, 9].

Diversos estudos mostram que as transições de fase entre as faixas de diferentes larguras são de primeira ordem, o que é consistente com a presença de um grande número de estados metaestáveis nas regiões de transição (Fig. 12) [29, 43, 9]. Em particular, a transição entre as fases de faixas  $h_1$  e  $h_2$  é encontrada em  $\delta = 1.2585$  [9]. No caso da transição entre faixas  $h_1$  e a fase líquido-tetragonal, foi verificada que a transição de fase é de segunda ordem com expoentes que dependem do valor de  $\delta$  [46, 43]. Para valores maiores que  $\delta > 1$  a transição é de primeira ordem fraca.

A existência da fase nemática também foi verificada nas simulações de Bab e coautores (2019) [10] usando o método de *dinâmica de tempos curtos* (STD). Seus resultados

sugerem que as transições de fase faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal são ambas do tipo KT, devido à dinâmica dos parâmetros de ordem apresentarem comportamento algébrico com o tempo, com um expoente que depende da temperatura. O diagrama de fases desses autores pode ser visto na figura 14, onde se pode ver que a fase nemática existe em uma faixa estreita de temperaturas para  $2 \leq \delta \leq 3.6$ .

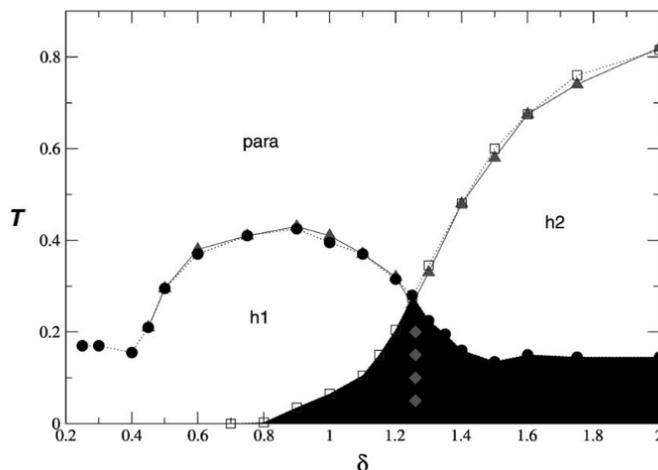


Figura 12 – Diagrama de fases  $(\delta, T)$  de Monte Carlo para  $0 \leq \delta \leq 2$ . Os triângulos denotam as temperaturas críticas  $T_c(\delta)$  obtidas através do calor específico para a transição entre as fases de faixas h1 e h2 e a fase paramagnética. Os diamantes denotam a linha de transição de primeira ordem entre as fases h1 e h2. A região sombreada corresponde à presença de estados metaestáveis. Fonte: [29].

A transição entre as fases de faixas e a fase líquido-tetragonal continua sendo um foco de controvérsia, especialmente no que diz respeito à ordem da transição. Essa controvérsia é uma consequência do caráter de longo alcance da interação dipolar, que introduz complicações como frustração, metaestabilidade e longos tempos de autocorrelação em simulações de Monte Carlo com algoritmos de atualização locais (e.g. Metropolis [47]) [29, 45, 10]. A presença de diversos estados metaestáveis a baixas temperaturas faz com que os sistemas levem longos intervalos de tempo para equilibrar, e por conta disso as transições de primeira ordem fracas podem ser mal interpretadas como transições de segunda ordem. Essas complicações tornam as simulações lentas e computacionalmente muito custosas, limitando os tamanhos de sistemas que podem ser investigados na prática, o que também dificulta as análises de escalonamento finito para o modelo.

Neste trabalho, estamos interessados em investigar a transição entre as fases de faixas e líquido-tetragonal, com o objetivo de determinar se existe uma fase nemática intermediária. Para este fim, utilizaremos as simulações de Monte Carlo, que serão apresentadas na seção 3.1. A fim de contornar algumas dificuldades referentes à termalização dos sistemas de baixas temperaturas, empregaremos o método de *Parallel Tempering*, que será introduzido na seção 3.3.

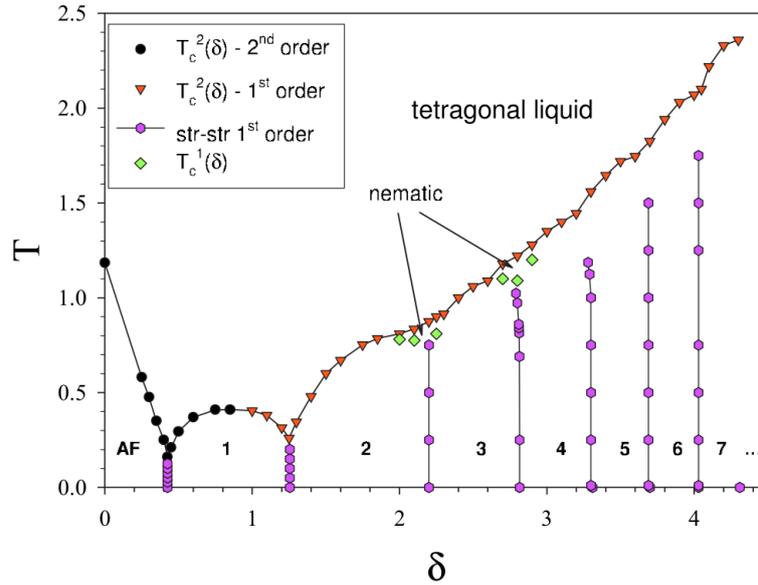


Figura 13 – Diagrama de fases  $(\delta, T)$  de Monte Carlo. Os números indicam a largura  $h$  de equilíbrio das fases de faixas de baixas temperaturas. A ordem das transições está indicada no *inset*. Fonte: [9].

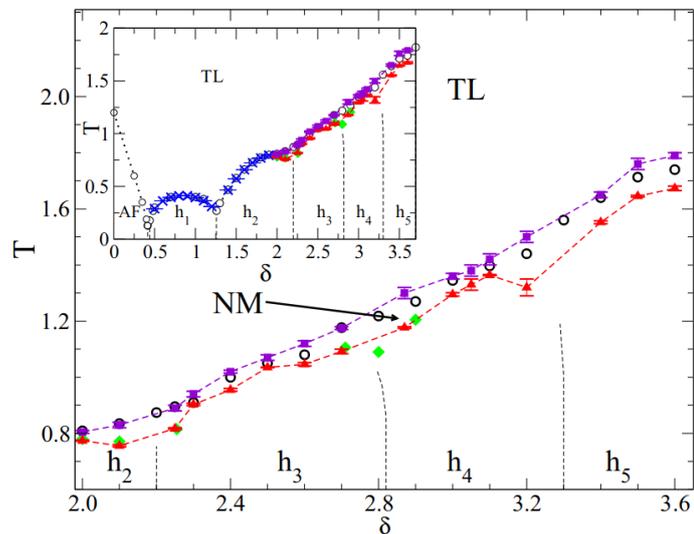


Figura 14 – Diagrama de fases  $(\delta, T)$  para  $2 \leq \delta \leq 3.6$ . As temperaturas  $T_1$  (triângulos) e  $T_2$  (quadrados) denotam as temperaturas de transição faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal, respectivamente. As linhas tracejadas representam as transições de primeira ordem entre estados de faixas com diferentes larguras. Os números indicam a largura  $h$  de equilíbrio das fases de faixas de baixas temperaturas. Em detalhe, o diagrama de fases completo a partir de  $\delta = 0$ . Fonte: [10].

### 3 Metodologia

Neste capítulo apresentamos os métodos numéricos utilizados para o estudo do modelo *Ising dipolar*. A seção 3.1 introduz o método de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis, que constituem a base das simulações realizadas no presente trabalho. Para mitigar efeitos de tamanho finito nas simulações, estudamos o modelo em uma rede bidimensional quadrada de lado  $L$  com condições de contorno periódicas. O caráter de longo alcance da interação dipolar complica a implementação das condições de contorno periódicas, e essas questões são abordadas na seção 3.2. Por fim, introduzimos o método de *Parallel Tempering* na seção 3.3, que ajuda na termalização dos sistemas de baixas temperaturas através da simulação simultânea e independente de diversas réplicas do sistema em diferentes temperaturas, governadas por um Hamiltoniano comum, eventualmente propondo trocas de temperatura entre essas simulações.

Como vimos na seção 2.4, o caráter de longo alcance da interação dipolar introduz uma série de complicações nas simulações de Monte Carlo. Essas simulações costumam ser feitas com algoritmos de atualização locais, como os algoritmos de Metropolis ou de banho térmico, que visitam novas configurações do sistema através da inversão de um spin por vez. A interação de longo alcance faz com que a inversão de um spin afete todos os demais spins. Por conta disso, o tempo necessário para realizar um passo de Monte Carlo para um sistema de tamanho  $N = L^2$  possui complexidade  $\mathcal{O}(N^2)$ , ao invés de  $\mathcal{O}(N)$  como no caso de interações de curto alcance. Isso torna as simulações computacionalmente muito pesadas e limita os tamanhos de sistema que podem ser investigados na prática [2].

Outra dificuldade devido ao longo alcance da interação dipolar está relacionada com os efeitos de borda e de tamanho finito. Esses efeitos podem ser mitigados através da implementação de condições de contorno periódicas, usando o método de somas de Ewald [2] ou a convenção da mínima imagem [48], discutidas em detalhe na seção 3.2. O fato de o estado fundamental corresponder a uma fase modulada de faixas de largura  $h(\delta)$  implica que o tamanho linear  $L$  do sistema deve ser comensurável com o período de modulação  $2h(\delta)$ . Caso contrário, introduzimos uma frustração artificial no sistema [40]. Além disso, pelo fato da largura das faixas do estado fundamental crescer exponencialmente com  $\delta = J/g$ , apenas sistemas com interações dipolares relativamente fortes são acessíveis às simulações [26].

Apesar dos efeitos de tamanho finito introduzirem complicações nas simulações, eles também carregam informações a respeito das divergências de volume finito de algumas quantidades termodinâmicas, como o calor específico e as susceptibilidades: comparando os resultados de simulações com diferentes tamanhos, podemos identificar tendências nessas

quantidades - um método conhecido como *escalonamento de tamanho finito* (FSS, do inglês *Finite Size Scaling*) [49, 50, 51, 52]. Esse método permite identificar divergências ou descontinuidades nos momentos da energia e dos parâmetros de ordem, auxiliando na caracterização das transições de fase.

O presente trabalho se propõe a investigar a transição entre a fase de faixas e a fase líquido-tetragonal nas simulações de Monte Carlo do modelo *Ising dipolar*. Estamos interessados em determinar se o modelo apresenta uma fase nemática intermediária nessa transição, e se este for o caso, temos também como objetivo a caracterização das transições de fase faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal.

### 3.1 Simulações de Monte Carlo

Vamos considerar um sistema de spins na rede em contato com um reservatório térmico que troca energia com o sistema e fixa sua temperatura - isto é, um sistema no *ensemble canônico*. Uma configuração desse sistema é determinada pela especificação do conjunto de variáveis de spin  $\{S_i\}_{i=1}^N$ , onde  $N$  é o número total de spins. Em particular, no caso de um sistema bidimensional em uma rede quadrada de lado  $L$ , temos que  $N = L^2$ . Essas variáveis são “variáveis de Ising”, no sentido de que assumem apenas os valores  $+1$  (*spin up*) e  $-1$  (*spin down*). A energia de uma determinada configuração pode ser computada através do Hamiltoniano do modelo *Ising dipolar*:

$$\mathcal{H} = -\delta \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \sum_{(i,j)} \frac{S_i S_j}{r_{ij}^3}, \quad (3.1)$$

onde  $\delta = J/g$  é a razão entre as interações de troca ferromagnética ( $J > 0$ ) de curto alcance e dipolar antiferromagnética ( $g > 0$ ) de longo alcance. A primeira soma é restrita a pares de primeiros vizinhos, e a segunda envolve todos os pares distintos de spins  $S_i = \pm 1$ , onde  $r_{ij}$  é a distância entre os sítios “i” e “j” em unidades da rede cristalina.

Idealmente, gostaríamos de computar a função de partição canônica do sistema

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta E\{s\}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (3.2)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e a soma é realizada sobre todos os estados do sistema. A partir dela, podemos extrair todas as quantidades termodinâmicas em que estamos interessados. Esse cálculo exato, no entanto, só é possível para sistemas muito particulares. Na maior parte dos casos não existe uma expressão analítica fechada para a função de partição, e precisamos recorrer a outros métodos para obtê-la.

Sabemos da mecânica estatística que um sistema em equilíbrio no ensemble canônico possui energias concentradas em uma faixa muito estreita de valores. Além do mais, sabemos que a probabilidade de ocorrência de um estado com energia  $E_n$  em um sistema

no ensemble canônico à temperatura  $T$  é dada pelo peso de Boltzmann

$$P(E_n) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}. \quad (3.3)$$

Como o número de configurações possíveis para o sistema cresce exponencialmente com o número de spins  $N_{conf} = 2^N$ , torna-se impraticável computar a função de partição exatamente, mesmo para os menores tamanhos de sistema. Mas nem tudo está perdido! Utilizando o fato de que as energias de um sistema em equilíbrio no ensemble canônico se concentram em uma faixa estreita em torno do valor de equilíbrio, e que cada configuração ocorre (no equilíbrio) com seu peso de Boltzmann, podemos recorrer a uma estratégia chamada “amostragem por importância” (*importance sampling*).

A amostragem por importância nos permite computar estimadores das quantidades médias de interesse utilizando apenas aquelas configurações que possuem contribuições significativas para a função de partição. Como apenas as configurações do sistema que possuem energias próximas à energia interna de equilíbrio contribuirão significativamente para a função de partição, o peso de Boltzmann surge então como uma “distribuição de probabilidades natural” para amostrar seletivamente os estados do sistema. Isto é, ao invés de visitarmos cada estado de maneira equiprovável, visitamos eles com seus pesos de Boltzmann apropriados. Dessa forma, os pesos estatísticos de cada configuração vêm incorporados nelas mesmas por construção, e podemos computar os estimadores das quantidades médias através de médias aritméticas simples.

Para fazer essa escolha de estados de modo que cada um apareça com o seu peso de Boltzmann correto, recorreremos a um processo estocástico de Markov: um mecanismo que uma vez em um dado estado  $\mu$  do sistema, passa a ocupar um novo estado  $\nu$  de maneira aleatória - isto é, o novo estado gerado  $\nu$  nem sempre é o mesmo, apesar de partirmos do mesmo estado inicial  $\mu$ . A probabilidade de o estado  $\nu$  ser ocupado a partir do estado  $\mu$  é chamada *probabilidade de transição* e denotada por  $P_{\mu \rightarrow \nu}$ . Um processo de Markov possui as seguintes propriedades:

- I ) as probabilidades de transição  $P_{\mu \rightarrow \nu}$  são independentes do tempo;
- II ) as probabilidades de transição  $P_{\mu \rightarrow \nu}$  dependem apenas dos estados  $\mu$  e  $\nu$ ;
- III )  $\sum_{\nu} P_{\mu \rightarrow \nu} = 1$ , significando que o processo deve ir a algum estado.

A propriedade (II) é às vezes chamada de “falta de memória”, pois o sistema “lembra” apenas do estado imediatamente anterior ao atual.

A ideia básica por trás das simulações de Monte Carlo é imitar as flutuações térmicas aleatórias que o sistema experiencia de um estado a outro ao longo do experimento. Isto pode ser feito utilizando o processo estocástico de Markov repetidas vezes para gerar uma

*cadeia de Markov* de estados (amostrados com seus respectivos pesos de Boltzmann). A partir dessa cadeia de estados, podemos calcular os estimadores das médias térmicas dos observáveis de interesse, como a energia e os parâmetros de ordem.

Para que o processo estocástico de Markov produza os estados com os pesos de Boltzmann adequados, é necessário que o processo satisfaça duas condições: a condição de *ergodicidade* e a *condição de balanço detalhado*. A *ergodicidade*, se refere à propriedade de que qualquer estado do sistema deve ser acessível a partir de qualquer outro em um número finito de passos de um processo estocástico de Markov. Essa condição nos permite tomar algumas probabilidades de transição  $P_{\mu \rightarrow \nu}$  como nulas, mas garante que haverá pelo menos um caminho de probabilidades de transição não-nulas entre quaisquer dois estados escolhidos [53]. A *condição de balanço* garante que a distribuição gerada após o sistema atingir o equilíbrio é a distribuição de Boltzmann. O sistema está em equilíbrio quando a taxa com que o sistema faz transições do estado  $\mu$  para todos os estados  $\nu$  é igual à taxa com que ele faz transições de  $\nu$  para  $\mu$  [53]:

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P_{\mu \rightarrow \nu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P_{\nu \rightarrow \mu}. \quad (3.4)$$

Utilizando a propriedade (III), podemos reescrever isso como:

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P_{\nu \rightarrow \mu}. \quad (3.5)$$

A distribuição de probabilidades  $p_{\mu}$  será um equilíbrio da dinâmica do processo de Markov para qualquer conjunto de probabilidades de transição  $\{P_{\mu \rightarrow \nu}\}$  que satisfaça a equação (3.5). No entanto, essa condição ainda é muito geral. Uma forma mais simples e restrita de garantir que ela seja satisfeita é impondo a igualdade termo a termo na equação (3.4):

$$p_{\mu} P_{\mu \rightarrow \nu} = p_{\nu} P_{\nu \rightarrow \mu}, \quad (3.6)$$

conhecida como *condição de balanço detalhado*. Essa condição garante que os estados gerados possuirão a distribuição de probabilidades desejada - os pesos de Boltzmann. O balanço detalhado impõe que, na média, o sistema deve transicionar do estado  $\mu$  ao estado  $\nu$  com a mesma taxa que realiza transições do estado  $\nu$  ao estado  $\mu$ . A condição de balanço detalhado elimina os ciclos-limite do processo de Markov, e garante que o sistema sempre tenderá à distribuição de probabilidades  $p_{\mu}$  quando  $t \rightarrow \infty$  [53]. O balanço detalhado pode ser interpretado como uma simetria de reversão temporal ou “reversibilidade microscópica”.

Queremos que a distribuição de probabilidades no equilíbrio seja a distribuição de Boltzmann (3.3). Substituindo esta na condição de balanço detalhado (3.6), temos que

$$\frac{P_{\mu \rightarrow \nu}}{P_{\nu \rightarrow \mu}} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}. \quad (3.7)$$

Assim, temos duas restrições para a escolha das probabilidades de transição  $P_{\mu \rightarrow \nu}$ :

$$\begin{aligned} \sum_{\nu} P_{\mu \rightarrow \nu} &= 1 \\ \frac{P_{\mu \rightarrow \nu}}{P_{\nu \rightarrow \mu}} &= \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Satisfazendo essas condições e à condição de ergodicidade, então é garantido que a distribuição de equilíbrio dos estados no processo de Markov será a distribuição de Boltzmann. Esses vínculos (normalização, ergodicidade, balanço detalhado) ainda nos deixam com uma certa liberdade na escolha das probabilidades de transição  $P_{\mu \rightarrow \nu}$ . Uma das escolhas mais amplamente utilizadas é o “Algoritmo de Metropolis”, que examinaremos em detalhe na próxima seção 3.1.1.

Em resumo: em uma simulação de Monte Carlo, utilizamos o processo estocástico de Markov repetidamente para gerar uma cadeia de Markov de estados. Dado um estado inicial  $\mu$ , utilizamos o processo para gerar um novo estado  $\nu$ , que é então submetido ao processo para gerar outro estado  $\lambda$ , e assim por diante. O processo de Markov é construído de uma maneira que, quando executado por tempo o suficiente, produz uma sucessão de estados que aparecem com as probabilidades dadas pela distribuição de Boltzmann (3.3). Esses estados são então utilizados para estimar as médias térmicas dos observáveis de interesse, e computar quantidades como os momentos da energia e dos parâmetros de ordem, que auxiliam na caracterização das transições de fase do sistema.

### 3.1.1 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis [47] é um dos algoritmos mais utilizados nas simulações de Monte Carlo. Ele se baseia na estratégia da amostragem por importância dos estados, imitando as flutuações térmicas de um sistema no ensemble canônico. No equilíbrio, os estados do sistema são amostrados com seus pesos de Boltzmann (3.3), e os estimadores das médias térmicas dos observáveis de interesse podem ser computados através de médias aritméticas simples - pois os pesos de Boltzmann vêm incorporados nos próprios estados por construção.

Para introduzir a amostragem por importância dos estados, podemos reescrever a a probabilidade de transição  $P_{\mu \rightarrow \nu}$  como o produto de uma probabilidade de seleção  $g(\mu \rightarrow \nu)$  e uma probabilidade de aceitação  $A(\mu \rightarrow \nu)$ :

$$P_{\mu \rightarrow \nu} = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) \quad (3.9)$$

A probabilidade de seleção  $g(\mu \rightarrow \nu)$  é a probabilidade do algoritmo gerar um determinado novo estado  $\nu$  a partir do estado inicial  $\mu$ . A probabilidade de aceitação  $A(\mu \rightarrow \nu)$  é a taxa com que o novo estado  $\nu$  é aceito quando ele é gerado a partir do estado  $\mu$ . Dessa forma, mesmo que as probabilidades de transição  $P_{\mu \rightarrow \nu}$  satisfaçam os vínculos de ergodicidade e

balanço detalhado, ainda temos uma certa liberdade para escolher as probabilidades de seleção e aceitação. Vale ressaltar que se as taxas de aceitação  $A(\mu \rightarrow \nu)$  forem muito baixas, o processo de Markov passa muito tempo “preso” nas mesmas configurações, e os estados amostrados podem não ser representativos do equilíbrio. Para que o algoritmo amostrasse uma ampla seleção de estados diferentes, uma possível solução é tornar a taxa de aceitação  $A(\mu \rightarrow \nu)$  o mais próximo da unidade o possível [53].

Escolhemos as probabilidades de seleção  $g(\mu \rightarrow \nu)$  de modo que a condição de ergodicidade seja satisfeita. No caso de spins de Ising, dado um estado inicial  $\mu$ , podemos chegar a qualquer outro estado  $\nu$  simplesmente invertendo um número finito de spins. Vale lembrar que um sistema no ensemble canônico passa a maior parte do seu tempo em um subconjunto de estados concentrados numa faixa estreita de energias, raramente visitando estados que alteram significativamente a energia do sistema. Com isso em mente, não desejamos propor transições entre estados  $\mu$  e  $\nu$  com energias muito diferentes. O jeito mais simples de gerar um novo estado  $\nu$  com energia próxima ao estado atual  $\mu$  é através da inversão de um único spin. Dizemos que os algoritmos que visitam estados através da inversão de um spin por vez possuem “dinâmica de inversão de um único spin” (SSFD, do inglês *single-spin-flip dynamics*) [53].

A dinâmica de inversão de um único spin garante que os novos estados gerados possuem energias próximas ao estado atual, e também garante a condição de ergodicidade - pois a partir de qualquer estado  $\mu$  é possível chegar a qualquer outro estado  $\nu$  em uma rede finita invertendo um número finito de spins. No algoritmo de Metropolis, escolhemos as probabilidades de seleção  $g(\mu \rightarrow \nu)$  para cada um dos estados possíveis  $\nu$  como iguais. Se o sistema possui  $N$  spins, com a SSFD temos  $N$  spins possíveis para inverter, e portanto temos  $N$  estados possíveis  $\nu$  que podemos atingir a partir do estado  $\mu$ . Temos portanto  $N$  probabilidades de seleção não-nulas, e cada uma delas toma o valor:

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}. \quad (3.10)$$

Com essas probabilidades de seleção, a condição de balanço detalhado (3.7) toma a forma:

$$\frac{P_{\mu \rightarrow \nu}}{P_{\nu \rightarrow \mu}} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (3.11)$$

Agora nós precisamos escolher as taxas de aceitação  $A(\mu \rightarrow \nu)$  de modo a satisfazer a equação (3.11). Para tornar o algoritmo o mais eficiente o possível, queremos maximizar as probabilidades de aceitação. Notando que a equação (3.11) especifica apenas a razão entre os pares de probabilidades de aceitação  $A(\mu \rightarrow \nu)$  e  $A(\nu \rightarrow \mu)$ , podemos atingir a maximização impondo uma dessas probabilidades como 1 e ajustando a outra de maneira a satisfazer o vínculo (3.11).

Por exemplo, suponha que os estados  $\mu$  e  $\nu$  são tais que  $E_\mu < E_\nu$ , isto é,  $\mu$  é o estado de menor energia. Então a maior taxa de aceitação é  $A(\nu \rightarrow \mu)$ , que tomamos

como  $A(\nu \rightarrow \mu) = 1$ , e para que a equação (3.11) seja satisfeita devemos ter  $A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ . Assim, o algoritmo ótimo é aquele que satisfaz

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, & \text{se } E_\nu > E_\mu \\ 1, & \text{outros casos.} \end{cases} \quad (3.12)$$

Isto é, se selecionamos um estado novo  $\nu$  que possui energia menor ou igual ao estado presente  $\mu$ , sempre aceitamos a transição para esse novo estado - imitando a tendência do sistema de minimizar a energia. Se o novo estado possui energia maior, então esse estado é aceito com a probabilidade da equação (3.12) - imitando as flutuações térmicas que o sistema sente pelo contato com o reservatório térmico à temperatura  $T$ . Esse é o algoritmo de Metropolis para o modelo de Ising com SSFD, um dos algoritmos mais famosos e amplamente utilizados nas simulações computacionais, introduzido por Nicolas Metropolis e coautores em 1953 [47].

As simulações realizadas no presente trabalho utilizaram o algoritmo de Metropolis com dinâmica de inversão de um único spin. A unidade de tempo dessas simulações é o passo de Monte Carlo (MCS, do inglês *Monte Carlo Step*), que consiste em um ciclo completo de tentativas de inverter um único spin. Elas foram utilizadas para amostrar os estados do sistema nas temperaturas de interesse. Para cada estado da cadeia de Markov, podemos calcular o valor do observável de interesse  $Q_i$ . Se uma determinada simulação visitou um total de  $M$  estados, então o estimador da média térmica desse observável  $\langle Q \rangle$  pode ser calculado através de uma média aritmética sobre os  $M$  estados:

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_i. \quad (3.13)$$

A fim de computar quantidades que auxiliam na caracterização das transições de fase do modelo, como os momentos da energia e dos parâmetros de ordem (introduzidos em detalhe no capítulo 4), calculamos também os estimadores da média térmica das potências quadráticas e quárticas dos observáveis de interesse:

$$\langle Q^{2k} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_i^{2k}, \quad k = 1, 2. \quad (3.14)$$

Como as simulações de Monte Carlo são baseadas em um processo estocástico de Markov - isto é, são geradas a partir de eventos aleatórios - os erros introduzidos nas medidas sucessivas de um observável são de natureza estatística. Por conta disso, o erro no estimador de um observável é simplesmente o erro padrão da média [53]:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2}{M - 1}}. \quad (3.15)$$

A expressão (3.15) assume que as medidas  $Q_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, M$  são estatisticamente independentes - o que em geral não é verdade. As simulações de Monte Carlo com algoritmos

de atualizações locais (como é o caso do algoritmo de Metropolis) produzem medidas sucessivas fortemente correlacionadas, o que gera amostras fortemente correlacionadas, introduzindo vieses nos estimadores dos observáveis de interesse e produzindo barras de erro não confiáveis. No modelo *Ising dipolar*, a situação é ainda pior, pois a frustração e a metaestabilidade fazem com que os sistemas apresentem longos tempos de relaxação para o equilíbrio [45]. Como uma alternativa, podemos calcular as barras de erro através do método Jackknife.

O método *Jackknife* é uma técnica de reamostragem que nos permite calcular os erros nos estimadores das médias térmicas dos observáveis em que estamos interessados. Nesse método, utilizamos um conjunto de  $M$  medidas independentes de uma simulação para calcular, por exemplo, o estimador do calor específico  $c(T)$  em uma determinada temperatura  $T$ . Além do estimador do calor específico, calculamos também outros  $M$  estimadores  $c_i(T)$  definidos como o valor do calor específico sobre um conjunto de  $M - 1$  medidas, onde a  $i$ -ésima medida da energia é deixada de fora. Isto é, a partir do conjunto de  $M$  medidas, removemos a primeira medida, restando as outras  $M - 1$  que então usamos para calcular o calor específico  $c_1$ . A primeira medida é colocada de volta no conjunto, e removemos a segunda medida para calcular  $c_2$  de maneira análoga, e assim por diante. Pode-se mostrar [53] que uma estimativa para o erro no estimador de  $c(T)$  é dada por:

$$\sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^n (c_i(T) - c(T))^2}, \quad (3.16)$$

onde  $c(T)$  é o estimador do calor específico considerando todas as  $M$  medidas. Este foi o método utilizado para calcular as barras de erros nos gráficos da seção 4.1.

## 3.2 Condições de Contorno Periódicas

Em uma simulação de Monte Carlo, a rede quadrada bidimensional de spins pode ser representada através de um conjunto de  $N = L^2$  variáveis inteiras, que assumem apenas os valores  $\pm 1$ , podendo ser guardadas em um vetor ou uma matriz. Esse conjunto de  $N$  variáveis representa a nossa caixa de simulação. Aplicar *condições de contorno periódicas* significa especificar que os spins em uma borda da caixa de simulação são vizinhos dos spins correspondentes na outra borda (ver figura 15). Para que as condições de contorno periódicas funcionem, é necessário que a caixa de simulação tenha um formato que preencha perfeitamente o cristal (neste caso, bidimensional). Nas simulações de Monte Carlo, as condições de contorno periódicas costumam ser aplicadas para tentar estimar as propriedades *bulk* do sistema.

A implementação de condições de contorno periódicas garante que todos os spins do sistema possuam o mesmo número de vizinhos e a mesma geometria local, de modo que não há spins na borda do sistema com propriedades diferentes dos demais. Desse modo,

todos os spins são equivalentes e o sistema possui simetria de translação [53]. Isso nos permite aproximar o comportamento do sistema no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$  usando apenas a informação de um sistema finito.

As interações de longo alcance introduzem fortes efeitos devido ao tamanho finito da rede de spins, pelo fato de cada spin sofrer a influência direta das bordas da rede. Aplicar condições de contorno periódicas ajuda a mitigar esses efeitos de tamanho finito, mas sua implementação é mais engenhosa quando o sistema possui interações de longo alcance. A forma usual de tratar esse problema é através da técnica de somas de Ewald [2] ou a convenção da mínima imagem [54].

No presente trabalho, as condições de contorno periódicas foram implementadas através da convenção da mínima imagem. A *convenção da mínima imagem* consiste em simplesmente anexar cópias da caixa de simulação em cada borda do sistema simulado. Desse modo, cada spin possui uma imagem replicada em cada um dos volumes fictícios, e cada spin na simulação interage apenas com a imagem mais próxima dos outros spins do sistema (ver figura 16). A comparação do efeito das somas de Ewald e da convenção da mínima imagem nos resultados das nossas simulações pode ser encontrada no apêndice A.

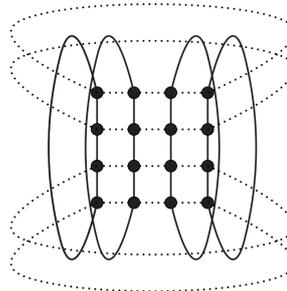


Figura 15 – Condições de contorno periódicas na rede bidimensional quadrada. Fonte: [55]

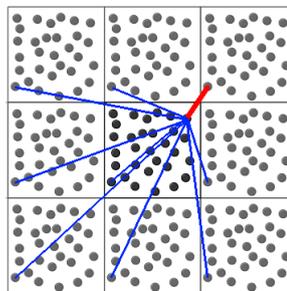


Figura 16 – Convenção da mínima imagem na rede bidimensional quadrada. A linha vermelha mostra a menor distância, utilizada para calcular a interação dipolar. As linhas azuis mostram as outras distâncias consideradas. Fonte: figura adaptada de [56]

### 3.3 Parallel Tempering

Uma das dificuldades com as simulações de Monte Carlo do modelo *Ising dipolar* está associada à frustração gerada pela competição de interações. A frustração faz com que o sistema apresente uma dinâmica lenta para o equilíbrio. Além disso, as fases de baixas temperaturas de sistemas complexos com interações competitivas costumam apresentar diversos mínimos locais que são separados uns dos outros por barreiras de energia, e o tempo característico para um sistema escapar de um mínimo local cresce exponencialmente com a diminuição da temperatura. Isso introduz um problema de relaxação nas simulações de Monte Carlo que utilizam algoritmos locais de atualização, como é o caso do algoritmo de Metropolis [7].

Uma possível abordagem para a simulação de sistemas com dinâmica lenta é o método de têmpera simulada (*simulated tempering*) desenvolvido por Marinari e Parisi (1992). Estamos especialmente interessados em uma variação desse método, denominada de *Parallel Tempering* [7]. O *Parallel Tempering* é um algoritmo pertencente à classe de métodos de ensemble estendido (*extended ensemble method*), que se baseia na ideia de que uma extensão do ensemble canônico pode ser introduzida de modo que seja possível realizar a amostragem de Monte Carlo eficientemente a baixas temperaturas.

A ideia básica do método de *Parallel Tempering* consiste na simulação de diversos sistemas independentes, descritos pelo mesmo Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , em diferentes temperaturas. Cada sistema é atualizado independentemente por  $t_{max}$  MCS e então são propostas trocas de temperaturas entre pares de sistemas com temperaturas distintas. Dessa forma, as simulações com temperaturas altas ajudam as simulações com temperaturas baixas a cruzar as barreiras de energia do sistema e escapar dos mínimos locais.

O método de *Parallel Tempering* que empregamos trata um sistema composto que consiste em diversas réplicas do sistema em questão [7]. A temperatura atribuída a cada réplica é distribuída de maneira a incluir fases de altas e baixas temperaturas. Esse sistema composto é simulado da seguinte maneira: na maior parte dos passos de tempo, simplesmente atualizamos cada sistema independentemente com o algoritmo de Metropolis; de vez em quando, ao invés de atualizar os sistemas, propomos trocas de temperaturas entre pares de réplicas com temperaturas vizinhas. A ideia é que as simulações de altas temperaturas auxiliem as simulações de baixas temperaturas a escapar dos mínimos locais da energia livre, ajudando o sistema a equilibrar adequadamente em cada temperatura.

Formalmente, o sistema composto consiste em  $M$  réplicas não-interagentes governadas por um Hamiltoniano comum  $\mathcal{H}(X)$ . Cada réplica  $m$  está em contato com um reservatório térmico associado à temperatura inversa  $\beta_m$  (por conveniência, tomamos  $\beta_m < \beta_{m+1}$ , i.e.  $T_m > T_{m+1}$ ). Um estado desse ensemble estendido é determinado pela especificação da configuração  $X_m$  de cada réplica,  $\{X\} = \{X_1, X_2, \dots, X_M\}$ . A função de

partição desse sistema é dada por:

$$\mathcal{Z} = Tr_{\{X\}} \exp \left[ - \sum_{i=1}^M \beta_m \mathcal{H}(X_m) \right] = \prod_{m=1}^M Z(\beta_m), \quad (3.17)$$

onde  $Z(\beta)$  é a função de partição do sistema original (célula unitária).

Para um dado conjunto de temperaturas  $\{\beta\}$ , a distribuição de probabilidades das configurações do sistema composto é dada por

$$P(X, \beta) = \prod_{m=1}^M P_{eq}(X_m, \beta_m), \quad (3.18)$$

onde

$$P_{eq}(X, \beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \exp\{-\beta \mathcal{H}(X)\} \quad (3.19)$$

são as distribuições de probabilidade de cada sistema individual na sua devida temperatura.

Para construir o processo de Markov, introduzimos a matriz de transição  $T(X, \beta_m | X', \beta_n)$  que representa a probabilidade de trocar as configurações das réplicas  $m$  e  $n$ . Para que o sistema permaneça em equilíbrio, é suficiente impor a condição de balanço detalhado para a matriz de transição [7]:

$$P(\dots; X, \beta_m; \dots; X', \beta_n; \dots) T(X, \beta_m | X', \beta_n) = P(\dots; X', \beta_m; \dots; X, \beta_n; \dots) T(X', \beta_m | X, \beta_n). \quad (3.20)$$

Utilizando a equação (3.19), podemos escrever:

$$\frac{T(X, \beta_m | X', \beta_n)}{T(X', \beta_m | X, \beta_n)} = e^{-\Delta}, \quad \Delta = (\beta_n - \beta_m)(\mathcal{H}(X) - \mathcal{H}(X')). \quad (3.21)$$

Adotando o algoritmo de Metropolis para a troca de réplicas, as probabilidades de transição entre réplicas podem ser expressadas como:

$$T(X, \beta_m | X', \beta_n) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta < 0 \\ e^{-\Delta}, & \text{se } \Delta > 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

onde  $\Delta$  é dado pela equação (3.21) e se refere à diferença de energia total (e não por spin) das duas simulações cuja troca está sendo proposta.

Quando estamos simulando mais de duas temperaturas por vez, é necessário lembrar que a faixa de valores de energia amostradas por um sistema no ensemble canônico a uma certa temperatura  $T$  decresce com o tamanho do sistema como  $1/\sqrt{N}$ . Além disso, a probabilidade de aceitação das trocas decai exponencialmente com a diferença das temperaturas inversas  $\beta_m - \beta_n$ . Por conta disso, as trocas propostas só serão aceitas quando

os sistemas a serem trocados tiverem energias comparáveis e/ou temperaturas próximas. Isso significa que as distribuições de energia das simulações a diferentes temperaturas devem se sobrepor para que as trocas sejam aceitas. Neste trabalho, cada simulação tentará trocar de temperatura apenas com as simulações que estão em temperaturas vizinhas (i.e. consideramos apenas trocas de réplicas com  $n = m + 1$ ), onde a sobreposição das distribuições de energia ainda é apreciável. Pode-se mostrar que esse algoritmo satisfaz as condições de ergodicidade e balanço detalhado, e que esse método amostra corretamente a distribuição de Boltzmann para cada uma das temperaturas simuladas [7].

O procedimento para a simulação do sistema no ensemble estendido com o algoritmo de *Parallel Tempering* pode ser resumido nos seguintes passos:

1. Cada réplica é simulada *simultaneamente e independentemente* no ensemble canônico com o algoritmo de Metropolis por  $t_{max}$  passos de Monte Carlo (MCS);
2. Após cada sistema ter sido atualizado por  $t_{max}$  MCS, são propostas trocas das temperaturas  $\beta_m$  e  $\beta_{m+1}$  entre pares de réplicas com temperaturas vizinhas; as trocas são aceitas com a probabilidade  $T(X_m, \beta_m | X_{m+1}, \beta_{m+1})$  da equação (3.22).

Uma implementação do método de *Parallel Tempering* utilizando MPI pode ser encontrada no repositório Github<sup>1</sup> de Rômulo Cenci, membro do grupo de Mecânica Estatística da Universidade Federal de Santa Catarina. Os resultados apresentados no capítulo 4 foram obtidos com base em uma adaptação desta implementação para o modelo *Ising dipolar*.

Uma escala de tempo relevante nessas simulações é o tempo  $t_{max}$  decorrido entre as tentativas de trocas de temperaturas das simulações. Um bom candidato para esse tempo característico é o *tempo de decorrelação*, definido a partir da função de autocorrelação de energia:

$$\begin{aligned} \chi_E(t) = & \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} E(t')E(t'+t) \\ & - \left( \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} E(t') \right) \left( \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} E(t'+t) \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Essa função mede quanto os valores de energia separados por um intervalo de tempo “t” estão correlacionados. Para tempos suficientemente longos, essa função decai como  $\chi_E(t) \sim e^{-t/\tau}$ , com uma escala característica dada pelo tempo de decorrelação  $\tau$ , que quantifica o tempo decorrido necessário para que dois estados possam ser considerados decorrelacionados. Um plot semi-logarítmico de  $\chi_E(t)$  nos permite estimar  $\tau$ . Alternativamente, podemos extrair essa escala de tempo olhando para o tempo de correlação integrado [53].

<sup>1</sup> <https://github.com/romcenci/ParallelTemperingMPI>

No presente trabalho, as medidas dos observáveis de interesse são realizadas logo antes das trocas de temperatura, e portanto o tempo  $t_{max}$  decorrido entre as trocas coincide com o número de passos de Monte Carlo (MCS) entre as medidas. Assim, escolhendo  $t_{max}$  igual ao tempo de decorrelação  $\tau$ , obteremos um conjunto de medidas decorrelacionadas para calcular os estimadores dos observáveis de interesse e suas barras de erro correspondentes.

O comportamento da função de autocorrelação de energia do modelo *Ising dipolar* para diferentes temperaturas pode ser visto na figura 17. Como se pode ver, após cerca de  $10^4$  MCS, os valores de energia já estão decorrelacionados. Com base nisso, nós escolhemos  $t_{max} = 10^4$  MCS como o tempo decorrido entre as tentativas de troca de temperatura no algoritmo de *Parallel Tempering*.

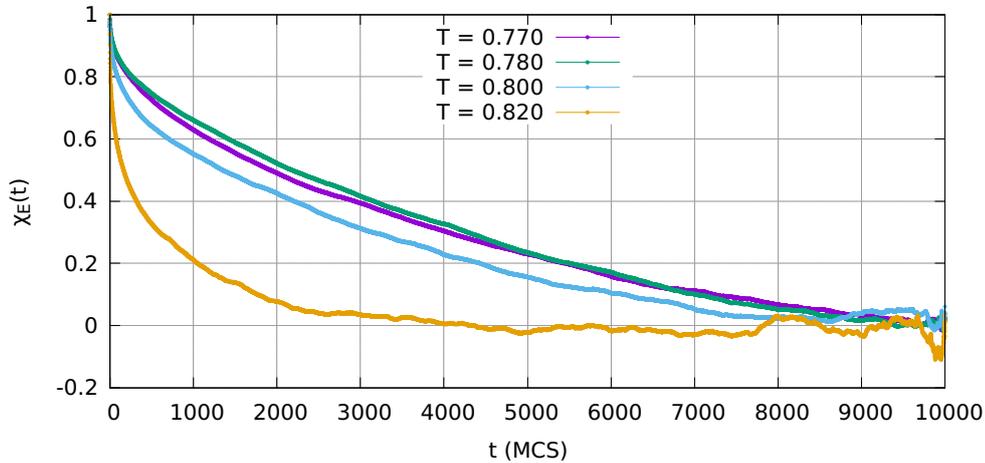


Figura 17 – Função de autocorrelação de energia em função dos passos de Monte Carlo para diferentes temperaturas no modelo *Ising dipolar* com  $L = 64$  e  $\delta = 2$ . As medidas de energia estão decorrelacionadas após  $t_{max} \approx 10^4$  MCS.

As simulações de Monte Carlo com o algoritmo de Metropolis ou banho térmico costumam ser feitas descartando longos períodos transientes (da ordem de  $10^6$  MCS), e realizando medidas por períodos ainda maiores (da ordem de  $10^7$  a  $10^8$  MCS). Esses longos períodos estão associados ao fato de o sistema demorar muito para equilibrar de maneira adequada. No presente trabalho, o número de medidas foi consideravelmente menor do que essas escalas típicas das simulações de Monte Carlo para o modelo, mas queremos mostrar que o processo de trocas de temperaturas do método de *Parallel Tempering* ajudou bastante na termalização de cada sistema, e apesar do número reduzido de amostras, a qualidade estatística das quantidades termodinâmicas estudadas se manteve boa, no sentido ser possível apreciar a presença das três fases (faixas, nemática e líquido-tetragonal) e das duas transições de fase reportadas na literatura [28, 8, 9, 10], conforme veremos no capítulo 4.

### 3.3.1 Distribuição de Temperaturas

A escolha da distribuição de temperaturas das réplicas possui uma grande influência no desempenho das simulações com *Parallel Tempering*. Neste trabalho, utilizamos o método iterativo de Hukushima e Nemoto (1996) [7] para determinar essa distribuição de temperaturas. Este método consiste em simular uma distribuição inicial de temperaturas  $\{\beta_m\}$  para estimar as probabilidades de aceitação das trocas  $\{p_m\}$ . Uma vez computadas as probabilidades de aceitação, construímos um novo conjunto de temperaturas  $\{\beta'_m\}$  a partir do conjunto antigo  $\{\beta_m\}$  através das relações:

$$\begin{aligned}\beta'_1 &= \beta_1 \\ \beta'_m &= \beta'_{m-1} + (\beta_m - \beta_{m-1}) \frac{p_m}{c}, \quad m = 2, 3, \dots, M. \\ c &= \frac{1}{M-1} \sum_{m=1}^M p_m\end{aligned}\tag{3.24}$$

até que a distribuição de temperaturas convirja.

A temperatura atribuída a cada réplica deve ser distribuída de modo que contemple tanto fases de altas e baixas temperaturas. A temperatura mais alta do conjunto deve se encontrar em uma fase de altas temperaturas do sistema, onde o tempo de relaxação (correlação) é muito curto e existe apenas um mínimo no espaço de energia livre. A temperatura mais baixa deve se situar em alguma região de baixas temperaturas cujas propriedades desejamos estudar.

Para que cada réplica consiga visitar toda a distribuição de temperaturas, as probabilidades de aceitação (3.22) do processo de trocas entre pares de réplicas em diferentes temperaturas devem ser próximas da unidade e aproximadamente constantes [7]. Esses autores [7] estimaram que o número de temperaturas simuladas deve ser da ordem de  $\sqrt{N}$ . No presente trabalho, realizamos as simulações com um número de temperaturas ( $M = 100$ ) maior que  $\mathcal{O}(\sqrt{N})$  para os tamanhos de sistemas investigados ( $N = L^2, 32 \leq L \leq 64$ ).

A evolução da distribuição de temperaturas com as iterações do método de Hukushima e Nemoto [7] para o modelo *Ising dipolar* pode ser vista na figura 18(a). O conjunto de temperaturas não foi modificado significativamente após cerca de 50 iterações. A figura 18(b) mostra as distribuições finais de temperatura obtidas pelo método de Hukushima e Nemoto para diferentes tamanhos de sistema. Vale notar que as distribuições de temperatura para os diferentes tamanhos de sistema convergiram para o mesmo conjunto de temperaturas.

A probabilidade de aceitação das trocas para cada temperatura pode ser vista na figura 19. Pode-se notar um acúmulo de temperaturas em torno da temperatura de transição. A probabilidade média de aceitação das trocas foi  $p_{acc,med} \approx 0.80 \pm 0.04$ , o que

é próximo da unidade, como os autores [7] sugerem, indicando que cada réplica conseguiu visitar uma boa parte do conjunto de temperaturas.

A comparação das distribuições de temperatura obtidas pelo método de Hukushima e Nemoto com as distribuições de temperatura com intervalos constantes em  $T$  e em  $\beta = 1/k_B T$  pode ser vista na figura 20. A distribuição obtida pelo método de Hukushima e Nemoto acumulou mais temperaturas em torno das regiões de transição, onde estamos interessados em realizar as investigações - e por esse motivo foi a distribuição escolhida para as simulações de *Parallel Tempering* do capítulo 4.

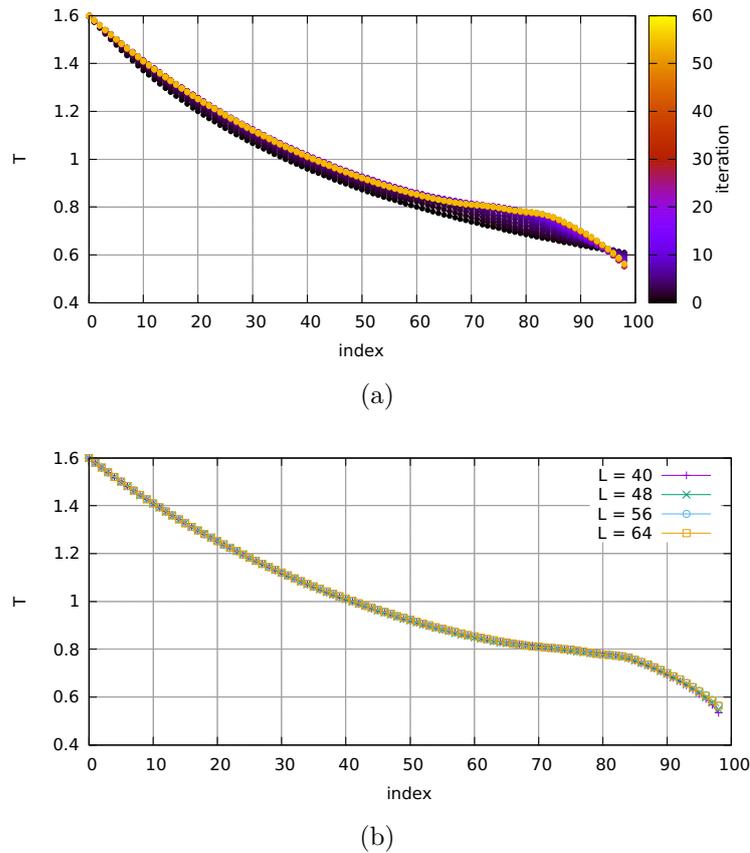


Figura 18 – (a) Evolução da distribuição de temperaturas com as iterações do método de Hukushima e Nemoto [7] para o modelo *Ising dipolar* com  $L = 56$ ,  $\delta = 2$  e  $M = 100$  temperaturas inicialmente equiespaçadas em  $\beta$  (i.e.  $\beta_{m+1} = \beta_m + \Delta$ ). (b) Distribuição final de temperaturas para diferentes tamanhos do sistema, inicialmente equiespaçadas em  $\beta$ . As distribuições de temperatura dos diferentes tamanhos de sistema convergiram para o mesmo conjunto de temperaturas.

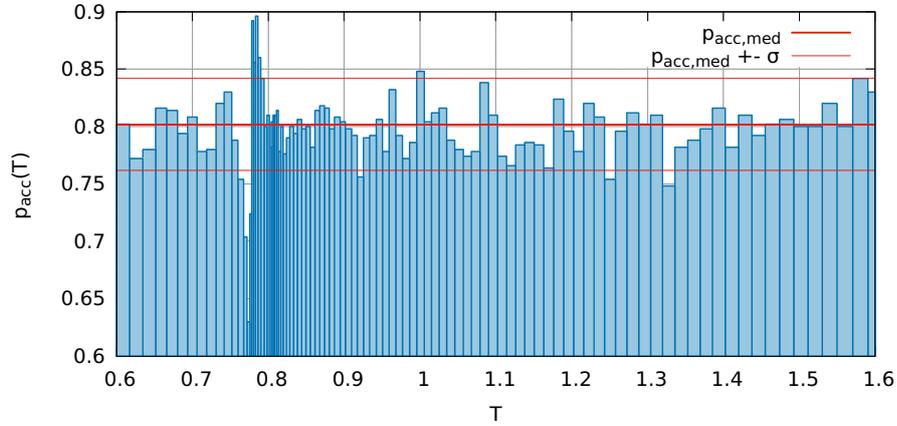


Figura 19 – Probabilidade de aceitação das trocas de temperatura em função da temperatura para  $L = 56$  e  $\delta = 2$ . Note o acúmulo de temperaturas em torno da região crítica. A probabilidade de aceitação média de trocas entre réplicas foi  $p_{acc,med} \approx 0.80 \pm 0.04$ .

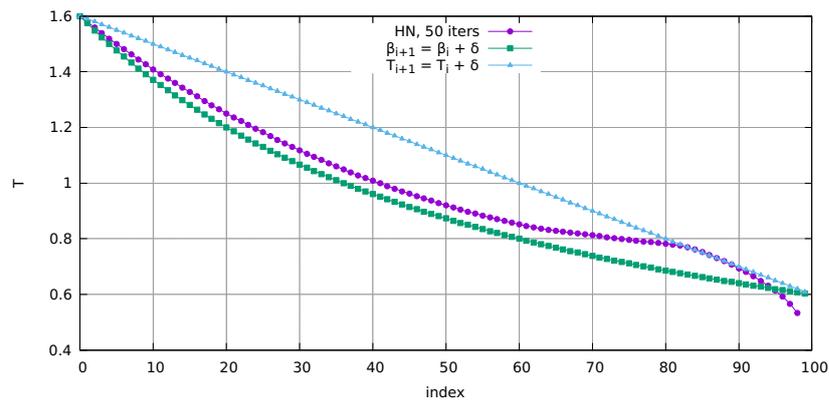


Figura 20 – Comparação das distribuições de temperatura com intervalos constantes em  $\beta = 1/T$  ( $\beta_{i+1} = \beta_i + \delta$ ), intervalos constantes em  $T$  ( $T_{i+1} = T_i + \delta$ ) e pelo método iterativo de Hukushima e Nemoto [7].

## 4 Resultados

Neste capítulo são apresentados os principais resultados desta dissertação, obtidos através de simulações de Monte Carlo do modelo Ising dipolar com o algoritmo de *Parallel Tempering* (seção 3.3). Nossos resultados apontam para a presença de uma fase nemática intermediária, apenas com ordem orientacional, entre as fases de faixas de baixas temperaturas e líquido-tetragonal de altas temperaturas. Esses resultados são consistentes com as simulações de Monte Carlo de Cannas e coautores (2006) [8], que foram pioneiros na identificação da fase nemática no modelo. Na seção 4.1 introduzimos os parâmetros de ordem posicional e orientacional, utilizados para distinguir os diferentes tipos de ordenamento em cada fase. A seção 4.2.1 apresenta os histogramas de energia e parâmetros de ordem para diferentes temperaturas, evidenciando a presença da fase nemática intermediária. Para confirmar o tipo de ordem em cada fase, analisamos as funções de correlação espaciais e orientacionais na seção 4.2.2. As temperaturas de transição são obtidas através da análise de escalonamento finito dos momentos da energia e dos parâmetros de ordem na seção 4.3.1, aonde também tentamos caracterizar a ordem de cada transição. Nossos resultados apontam para a existência de uma fase nemática em uma faixa estreita de temperaturas, que parece ser estável no limite termodinâmico. A presença de pares de picos nas distribuições de energia e parâmetros de ordem na vizinhança da transição faixas-nemática, em conjunto com o comportamento de escalonamento de tamanho finito do calor específico e do cumulante de 4ª ordem da energia são consistentes com uma transição de fase de primeira ordem. A transição faixas-nemática também apresenta pares de picos nas distribuições de energia, mas as distribuições de parâmetros de ordem parecem indicar uma transição contínua. A interpretação desses resultados é complicada devido aos fortes efeitos de tamanho finito introduzidos pelo caráter de longo alcance da interação dipolar. A simulação de sistemas maiores ainda se faz necessária para caracterizar adequadamente essas transições.

Para evitar introduzir uma frustração artificial no sistema, os tamanhos de sistema ( $L$ ) simulados devem ser comensuráveis com a largura de equilíbrio das faixas  $h(\delta)$  para o  $\delta$  correspondente [40]. Nosso trabalho se concentrou principalmente no caso com  $\delta = 2$ , que corresponde a um estado fundamental de faixas de largura  $h = 2$ . Este valor foi escolhido a fim de comparar nossos resultados com algumas das simulações de Monte Carlo presentes na literatura [30, 8, 9, 10]. Em alguns desses trabalhos [30, 8, 9], as condições de contorno periódicas foram implementadas através do método de somas de Ewald, enquanto que no presente trabalho elas foram implementadas através da convenção da mínima imagem. A comparação do efeito das somas de Ewald e da convenção da mínima imagem nos resultados das nossas simulações pode ser encontrada no apêndice A.

O cálculo dos observáveis de interesse foi feito para cada uma das temperaturas  $T$  e tamanhos de sistema  $L$  utilizando o método de *Parallel Tempering* introduzido na seção 3.3. Essas simulações foram realizadas com  $M = 100$  réplicas dos sistemas utilizando o algoritmo de Metropolis. A distribuição de temperaturas utilizada foi aquela obtida pelo método de Hukushima e Nemoto [7] descrito na seção 3.3.1, com temperaturas entre  $0.6 \leq T \leq 1.6$  inicialmente equiespaçadas em  $\beta = 1/k_B T$ . Cada réplica foi simulada por  $t_{max} = 10^4$  MCS, e em seguida foram realizadas tentativas de trocas de temperaturas entre as réplicas. Após as trocas de temperatura, cada réplica é atualizada por mais  $t_{max}$  MCS e então as trocas de temperaturas são propostas novamente. Esse processo foi repetido  $N_{trocas} = 10^4$  vezes, de modo que cada temperatura foi simulada por um total de  $N_{trocas} \cdot t_{max} = 10^8$  MCS. As medidas foram realizadas a cada  $t_{max}$  MCS, gerando um total de  $M \cdot N_{trocas} = 10^6$  medidas *descorrelacionadas*<sup>1</sup> de energia e parâmetros de ordem. Para efetuar o cálculo dos momentos da energia e parâmetros de ordem, as primeiras  $10^3$  trocas foram descartadas para a termalização. Os detalhes técnicos sobre os tempos de simulação e os recursos computacionais utilizados para produzir os resultados deste capítulo podem ser encontrados no apêndice B.

## 4.1 Momentos da Energia e dos Parâmetros de Ordem

Um dos principais objetivos do presente trabalho é investigar como se dá a transição entre as fases ordenadas de faixas e a fase líquido-tetragonal. Como vimos no capítulo 2, algumas teorias [4] apontam para a presença de uma fase nemática intermediária entre as fases de faixas e a fase líquido-tetragonal. A fase nemática já foi detectada em algumas simulações de Monte Carlo presentes na literatura [8, 9, 10], mas a natureza das transições de fase faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal permanece uma questão em aberto.

A fase nemática é caracterizada por apresentar de ordem orientacional de longo alcance sem apresentar ordem posicional. Para que seja possível identificá-la, é necessário introduzir os parâmetros de ordem adequados para medir esses tipos específicos de ordem. O *parâmetro de ordem posicional* está relacionado com a existência de periodicidade nas direções cartesianas  $\hat{\alpha} = \hat{x}, \hat{y}$  e quantifica o quanto um certo estado se assemelha a um estado de faixas de largura  $h$ . Utilizando uma forma análoga àquela introduzida por Gleiser e coautores (2002) [29], esse parâmetro de ordem pode ser calculado através das quantidades:

$$m_x = \frac{1}{N} \sum_{x=0}^{L-1} \sum_{y=0}^{L-1} (-1)^{(x-\phi_x)/h} S(x, y), \quad (4.1)$$

e

$$m_y = \frac{1}{N} \sum_{x=0}^{L-1} \sum_{y=0}^{L-1} (-1)^{(y-\phi_y)/h} S(x, y), \quad (4.2)$$

<sup>1</sup> Ver função de autocorrelação de energia na seção 3.3

onde  $S(x, y)$  é o spin com coordenadas  $x, y$  na rede quadrada, e  $\phi_x$  e  $\phi_y$  são as fases correspondentes, quantificando onde começa a oscilação da modulação. Para determinar  $m_x$  ( $m_y$ ), deve-se calcular todos seus valores para as diferentes fases entre  $0$  e  $x\%h$  ( $y\%h$ ) e tomar o maior deles. O parâmetro de ordem posicional global, também chamado de *magnetização staggered* é então definido como:

$$m_{st} = \sqrt{m_x^2 + m_y^2}. \quad (4.3)$$

Em uma fase de faixas de largura  $h$  completamente ordenada, temos  $m_{st} = 1$ . Nas fases nemática, líquido-tetragonal e paramagnética, temos  $m_{st} = 0$ .

O *parâmetro de ordem orientacional*, introduzido por Booth e coautores (1995) [28], é definido como:

$$\eta = \frac{n_v - n_h}{n_v + n_h} \quad (4.4)$$

onde  $n_v$  ( $n_h$ ) é o número de ligações verticais (horizontais) entre pares de spins com sinais opostos. Esse parâmetro toma valor  $\eta = +1$  ( $-1$ ) em um estado de faixas verticais (horizontais) completamente ordenado, e  $\eta = 0$  nas fases líquido-tetragonal ou paramagnética. Nas análises que seguem, não estamos interessados em diferenciar a direção preferencial das faixas (vertical ou horizontal), mas apenas em determinar se a ordem orientacional está ou não presente no sistema. Por esse motivo, as médias estatísticas do parâmetro de ordem orientacional serão tomadas com respeito a seu valor absoluto  $\langle |\eta| \rangle$ .

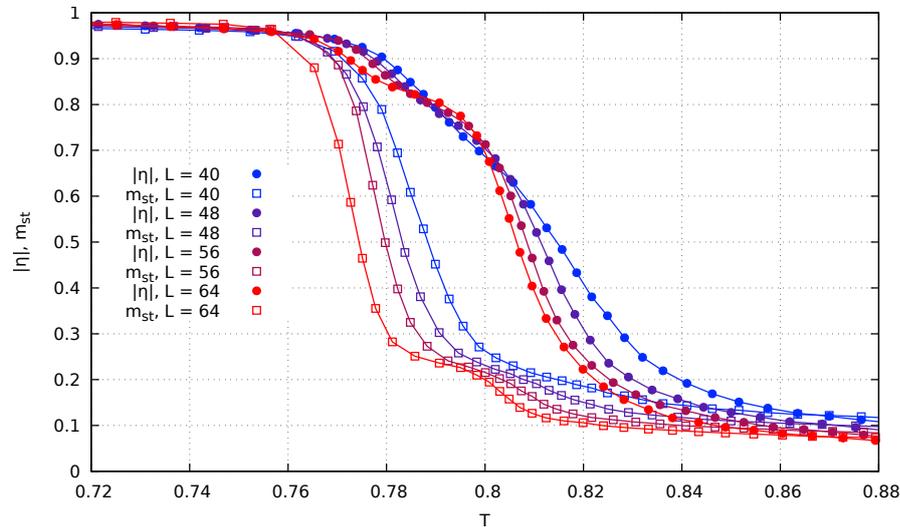


Figura 21 – Parâmetros de ordem posicional  $m_{st}$  e orientacional  $|\eta|$  em função da temperatura para  $\delta = 2$  e diferentes tamanhos do sistema. A fase nemática está presente na faixa de temperaturas  $0.78 \lesssim T \lesssim 0.82$ . As barras de erro foram ocultadas pois seus tamanhos foram inferiores aos dos pontos.

A figura 21 mostra o comportamento dos parâmetros de ordem posicional  $m_{st}$  e orientacional  $|\eta|$  em função da temperatura para  $\delta = 2$  e diferentes tamanhos de sistema.

A região em que  $m_{st} \approx 1$  e  $|\eta| \approx 1$  corresponde à fase de faixas de largura  $h = 2$ . Em  $T \approx 0.78$ , o sistema perde a ordem posicional, mas mantém a ordem orientacional de longo alcance e se encontra na fase nemática intermediária. Em  $T \approx 0.82$  o sistema perde a ordem orientacional, resultando na fase líquido-tetragonal.

Apesar de ser possível identificar visualmente a fase nemática na figura 21, a análise dos parâmetros de ordem sozinha não nos fornece informações sobre a natureza das transições de fase. Quantidades como o calor específico, as susceptibilidades e cumulantes de Binder são melhores indicadores das transições.

A susceptibilidade é uma medida de como um determinado tipo de ordem do sistema responde à presença de um campo conjugado  $H$ . Ela é definida como

$$\chi_{\sigma}(L, T) = \frac{\partial \sigma}{\partial H} = \frac{N}{T} [\langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2], \quad (4.5)$$

onde  $\sigma$  corresponde ao parâmetro de ordem posicional ( $m_{st}$ ) ou orientacional ( $\eta$ ). As susceptibilidades carregam informações interessantes sobre as transições, pois exibem comportamento não-analítico na temperatura crítica, divergindo em transições de segunda ordem e sendo descontínuas em transições de primeira ordem.

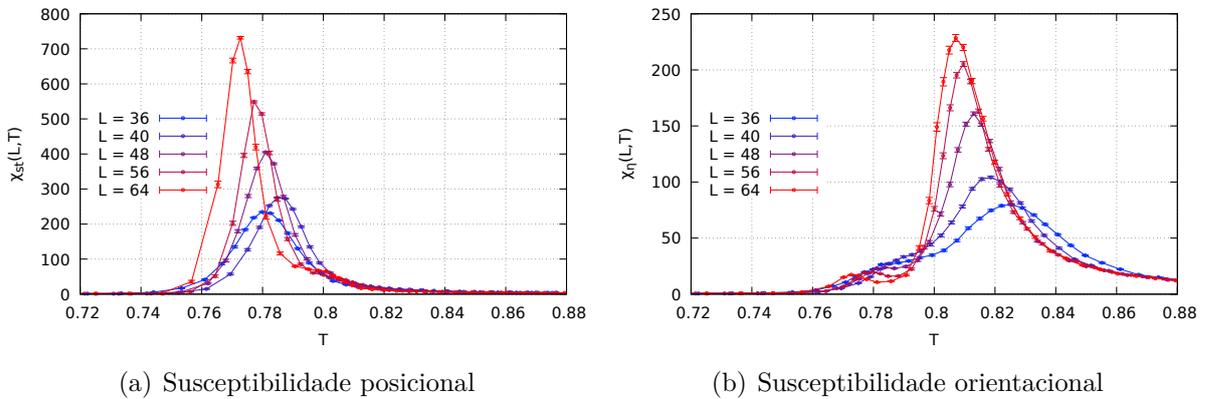


Figura 22 – Susceptibilidades dos parâmetros de ordem posicional e orientacional em função da temperatura para  $\delta = 2$  e diferentes tamanhos do sistema.

O comportamento das susceptibilidades dos parâmetros de ordem em função da temperatura para  $\delta = 2$  e diferentes tamanhos de sistema pode ser visto na figura 22. Pelo fato das simulações de Monte Carlo serem feitas em sistemas com tamanhos finitos, as susceptibilidades apresentam picos ao invés de divergências. A susceptibilidade posicional (Fig. 22(a)) apresenta um máximo na chamada *pseudo-temperatura crítica*  $T_1^{m_{st}}(L)$  e está associada à perda da ordem posicional da fase de faixas, resultando na fase nemática. A susceptibilidade orientacional (Fig. 22(b)) também apresenta um máximo na pseudo-temperatura crítica  $T_2^{\eta}(L)$  e está associada à perda da ordem orientacional da fase nemática, resultando na fase líquido-tetragonal.

A altura dos máximos das susceptibilidades dos parâmetros de ordem cresce com o aumento do tamanho do sistema, indicando uma possível divergência dessas quantidades no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ). Como essas transições ocorrem em temperaturas distintas, isso indica que há uma faixa estreita de temperaturas em que a fase nemática é estável no limite termodinâmico. Assim, as pseudo-temperaturas críticas  $T_1^{m_{st}}(L)$  e  $T_2^x(L)$  devem corresponder às temperaturas de transição faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal para o tamanho  $L$ , respectivamente. Na seção 4.3.1 essas temperaturas serão extrapoladas para o limite ( $L \rightarrow \infty$ ).

O cumulante de Binder [51, 52, 48], definido como

$$V_\sigma(L, T) = 1 - \frac{\langle \sigma^4 \rangle}{3\langle \sigma^2 \rangle^2}, \quad \sigma = \eta, m_{st} \quad (4.6)$$

também auxilia na caracterização da ordem da transição. Em uma transição de segunda ordem, o cumulante assume o mesmo valor em  $T_c$  para os diferentes tamanhos de sistema e decresce continuamente com o aumento da temperatura. Em transições de primeira ordem, a coexistência de fases faz com que o cumulante apresente comportamento não-monotônico, desenvolvendo um mínimo que se aproxima de  $T_c$  e se torna mais estreito e profundo com o aumento do tamanho do sistema. Por conta disso, o cumulante serve como um bom estimador de  $T_c$  em transições de segunda ordem, e um bom indicador de transições de fase de primeira ordem.

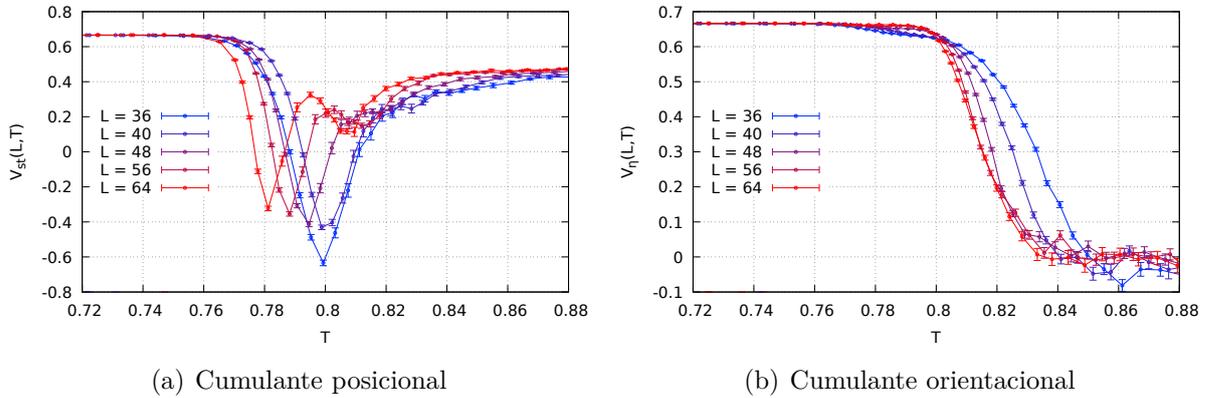


Figura 23 – Cumulantes de Binder dos parâmetros de ordem posicional e orientacional em função da temperatura para  $\delta = 2$  e diferentes tamanhos de sistemas.

O comportamento dos cumulantes posicional e orientacional pode ser visto na figura 23. O cumulante posicional (Fig. 23(a)) apresenta um comportamento não-monotônico, o que indica a presença de coexistência de fases nessa transição, indicando uma transição faixas-nemática de primeira ordem. No entanto, esse mínimo não se torna mais profundo com o aumento do tamanho do sistema, e esse caráter de primeira ordem pode ser apenas um efeito de tamanho finito. O cumulante orientacional (Fig. 23(b)) apresenta um comportamento decrescente com o aumento da temperatura, consistente com uma

transição nemática-líquido-tetragonal de segunda ordem. O cruzamento dos cumulantes orientacionais para os diferentes tamanhos de sistema sugere a temperatura de transição  $T \approx 0.8$ .

Outras quantidades que também servem como bons indicadores de transições de fase num sistema são o calor específico

$$C(L, T) = \frac{1}{NT^2} \left( \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 \right), \quad (4.7)$$

e o cumulante de Binder da energia

$$V_e(L, T) = 1 - \frac{\langle \mathcal{H}^4 \rangle}{3\langle \mathcal{H}^2 \rangle^2}, \quad (4.8)$$

que podem ser calculados através das medidas de energia (e suas potências quadráticas e quárticas) computadas a partir do Hamiltoniano do modelo *Ising dipolar* (2.5).

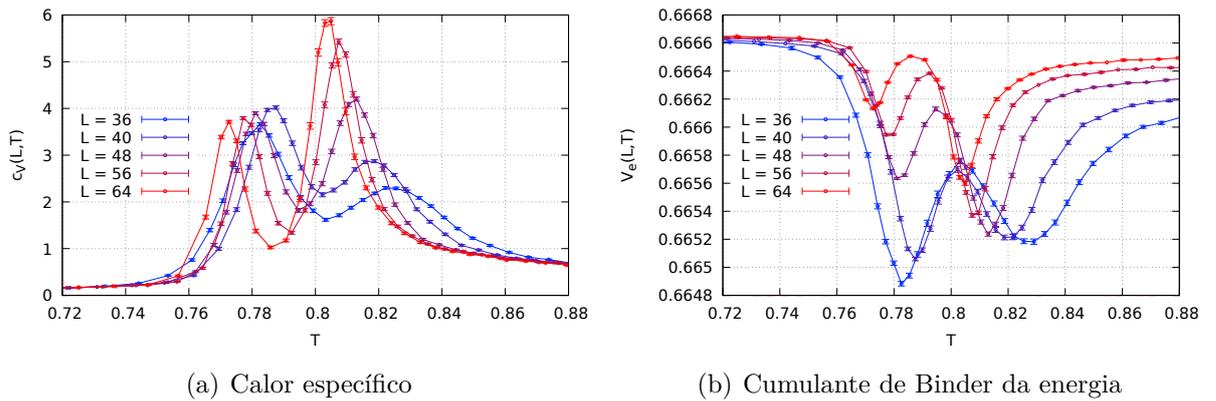


Figura 24 – Calor específico e cumulante de Binder da energia em função da temperatura para  $\delta = 2$  diferentes tamanhos de sistemas.

A figura 24 mostra o comportamento do calor específico e do cumulante de Binder da energia em função da temperatura para diferentes tamanhos do sistema. A presença de dois picos no calor específico (Fig. 24(a)) e de dois mínimos no cumulante de Binder (Fig. 24(b)) em temperaturas distintas indica a presença de duas transições de fase. Denotamos as pseudo-temperaturas críticas obtidas através dos máximos do calor específico por  $T_1^c(L), T_2^c(L)$ , e dos mínimos do cumulante de Binder por  $T_1^v(L), T_2^v(L)$ . A altura do pico de menor temperatura não cresce com o aumento do tamanho do sistema, indicando uma possível saturação do calor específico nessa transição, o que seria consistente com uma transição KT. Por outro lado, a altura do pico de maior temperatura cresce com o aumento do tamanho do sistema, indicando uma possível divergência nessa transição no limite termodinâmico. As pseudo-temperaturas críticas associadas a esses picos sofrem um deslocamento para temperaturas menores com o aumento do tamanho do sistema. O comportamento não-monotônico do cumulante de Binder (Fig. 24(b)) sugere uma transição

de fase de primeira ordem. No entanto, esses mínimos não se tornam mais profundos com o aumento do tamanho do sistema, podendo ser apenas um efeito de tamanho finito.

Como podemos ver, as simulações de Monte Carlo do modelo *Ising dipolar* com o método de *Parallel Tempering* foram capazes de detectar a presença de duas transições de fase em temperaturas distintas a partir do comportamento do calor específico, das susceptibilidades e dos cumulantes de Binder. No entanto, devido aos fortes efeitos de tamanho finito presentes nas simulações, ainda não podemos concluir nada sobre a natureza das transições. O fato de o parâmetro de ordem posicional ir a zero enquanto o parâmetro de ordem orientacional ainda assume valores não-nulos (Fig. 21) parece indicar que entre as fases de faixas e líquido-tetragonal há uma fase intermediária apenas com ordem orientacional - que acreditamos ser a fase nemática.

Nas seções que seguem, vamos investigar mais a fundo as fases de equilíbrio e as transições de fase analisando as distribuições de energia e parâmetros de ordem (Sec. 4.2.1) e as funções de correlação (Sec. 4.2.2). Por fim, na seção (Sec. 4.3.1), realizamos uma análise de escalonamento finito das pseudo-temperaturas críticas  $T_1(L)$  e  $T_2(L)$  obtidas a partir de diferentes quantidades, a fim de determinar as temperaturas das transições faixas-nemática  $T_1$  e nemática-líquido-tetragonal  $T_2$  no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ).

## 4.2 Análise das Fases Individuais

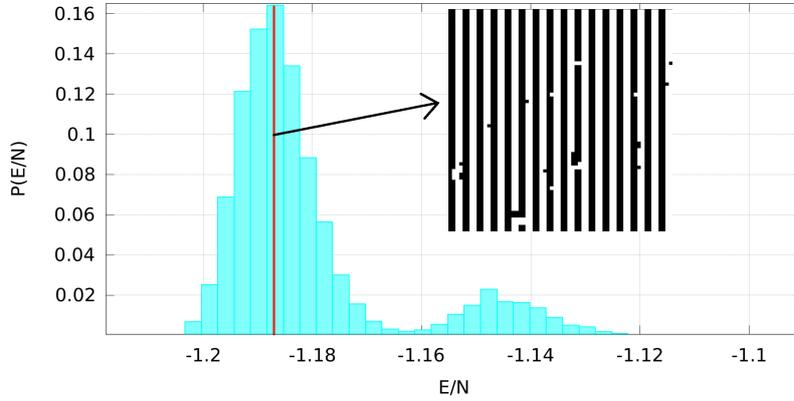
Nesta seção, investigamos as fases individuais e os tipos de ordem que elas apresentam. Para este fim, vamos analisar as distribuições de energia e parâmetros de ordem (Sec. 4.2.1), bem como as funções de correlação (Sec. 4.2.2) em cada uma das fases. Após termos uma caracterização de cada fase, vamos analisar essas mesmas distribuições nas transições de fase faixas-nemática e nemática tetragonal na seção 4.3, a fim de caracterizar a natureza dessas transições.

### 4.2.1 Distribuições de Energia e Parâmetros de Ordem

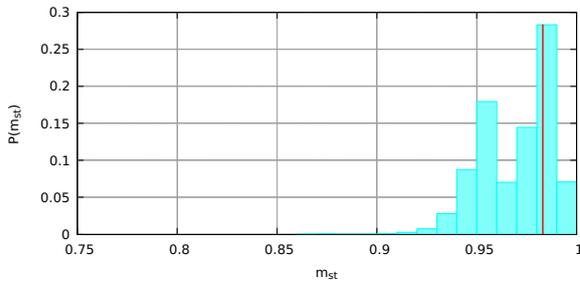
As distribuições de energia de um sistema em equilíbrio no ensemble canônico costumam apresentar um perfil gaussiano em torno do valor da energia de equilíbrio. Essa mesma fenomenologia pode ser observada nas distribuições dos parâmetros de ordem. Nesta seção, vamos investigar as distribuições de equilíbrio de energia e parâmetros de ordem, a fim de determinar os valores típicos dessas quantidades em cada uma das fases de equilíbrio.

O comportamento das distribuições de energia por spin e parâmetros de ordem na fase de baixas temperaturas em  $T = 0.765$  pode ser visto na figura 25. A configuração típica mostra que esta é de fato uma fase de faixas de largura  $h = 2$ , com parâmetros

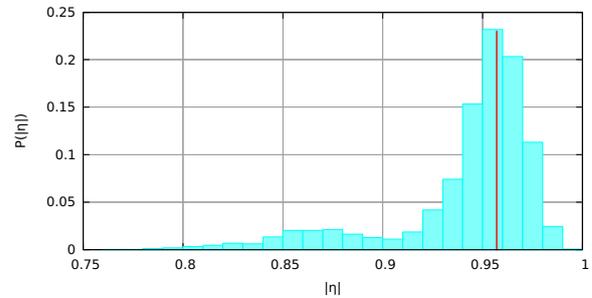
de ordem posicional  $m_{st} = 0.983 \approx 1$  e orientacional  $|\eta| = 0.957 \approx 1$ , consistente com o comportamento dos parâmetros de ordem (Fig. 21) nessa região de temperaturas.



(a) Energia por spin



(b) Parâmetro de ordem posicional



(c) Parâmetro de ordem orientacional

Figura 25 – Distribuições de (a) energia por spin e parâmetros de ordem (b) posicional e (c) orientacional na fase de faixas, para  $T = 0.765$ ,  $\delta = 2$  e  $L = 64$ . Em detalhe, a configuração típica da fase de faixas. As linhas vermelhas mostram o valor da energia por spin ( $E/N = -1.187$ ) e dos parâmetros de ordem posicional ( $m_{st} = 0.983$ ) e orientacional ( $|\eta| = 0.957$ ) da configuração típica.

As distribuições de energia por spin e parâmetros de ordem na fase intermediária em  $T = 0.790$  podem ser vistas na figura 26. O fato de o parâmetro de ordem posicional ter caído significativamente ( $m_{st} = 0.173$ ) enquanto o parâmetro de ordem orientacional continua a assumir valores significativos ( $|\eta| = 0.832$ ) confirma que esta fase apresenta ordem orientacional, mas não apresenta ordem posicional. A configuração típica mostra que essa fase apresenta defeitos topológicos (dislocações) na estrutura de faixas subjacente, que reduzem o valor médio do parâmetro de ordem orientacional, sendo consistente com a descrição da fase nemática introduzida por Abanov e coautores (1995) [4]. Essa configuração é similar às configurações típicas da fase nemática observadas nas simulações de Cannas e coautores (2006) [8].

As distribuições de energia por spin e parâmetros de ordem na fase de altas temperaturas em  $T = 0.820$  podem ser vistas na figura 27. Nessa fase, os dois parâmetros de ordem são praticamente nulos  $m_{st} \approx 0.081$ ,  $|\eta| \approx 0.055$ , o que mostra que essa fase não

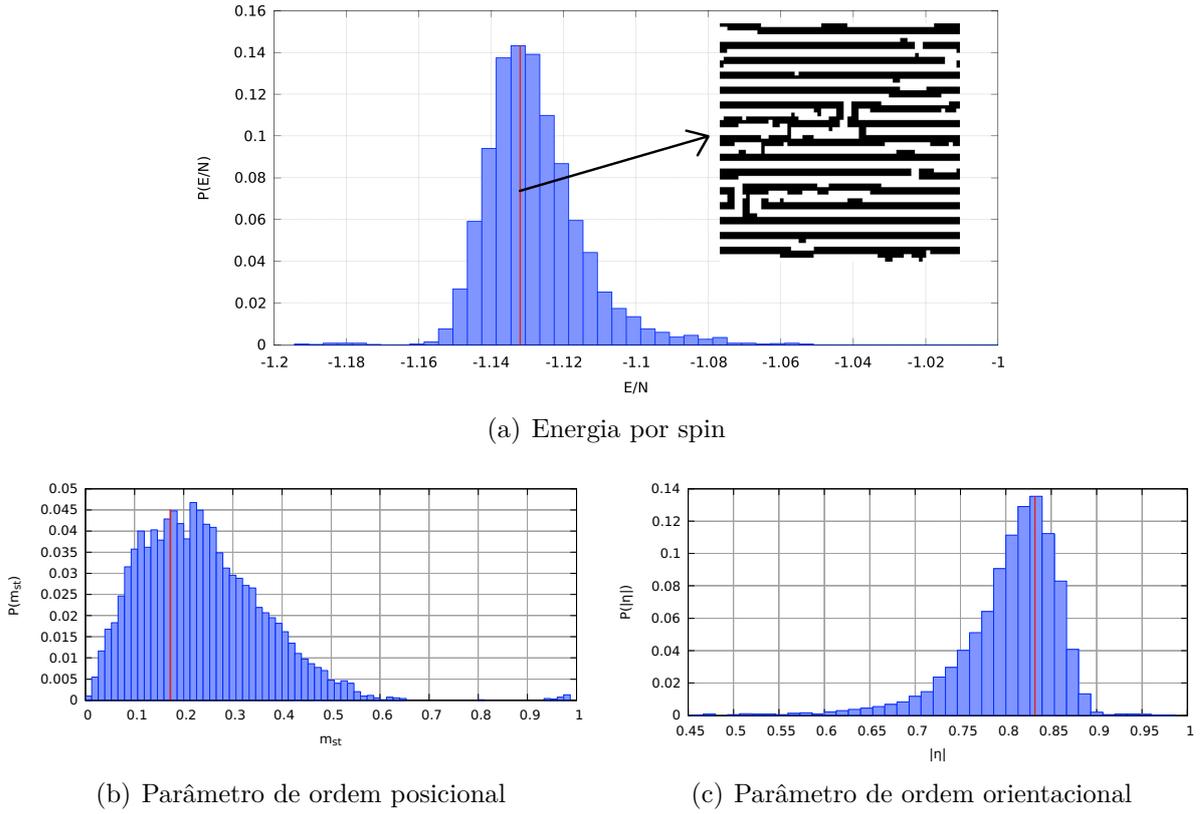


Figura 26 – Distribuições de (a) energia por spin e parâmetros de ordem (b) posicional e (c) orientacional na fase nemática, para  $T = 0.790$ ,  $\delta = 2$  e  $L = 64$ . Em detalhe, a configuração típica da fase nemática. As linhas vermelhas mostram o valor da energia por spin ( $E/N = -1.137$ ) e dos parâmetros de ordem posicional ( $m_{st} = 0.173$ ) e orientacional ( $|\eta| = 0.832$ ) da configuração típica.

apresenta ordens posicional ou orientacional. A configuração típica mostra que o sistema ainda apresenta domínios bem definidos e predominantemente quadrados, consistente com a descrição da fase líquido-tetragonal no trabalho de Abanov e coautores (1995) [4].

Essas distribuições de equilíbrio de energia e parâmetros de ordem e as configurações típicas associadas confirmam a existência de três fases termodinâmicas distintas com diferentes tipos de ordem. A fase de baixas temperaturas (Fig. 25) corresponde à fase de faixas, a fase intermediária (Fig. 26) corresponde à fase nemática, e a fase de altas temperaturas (Fig. 27) corresponde à fase líquido-tetragonal. Para confirmar esses resultados, analisamos também o comportamento das funções de correlação em cada uma dessas fases na seção 4.2.2.

#### 4.2.2 Funções de Correlação

As funções de correlação fornecem informações sobre a morfologia e os tipos de ordem nas fases do sistema, auxiliando na sua caracterização. No caso de sistemas bidimensionais, três tipos de ordem podem ser distinguidos: ordem de longo alcance,

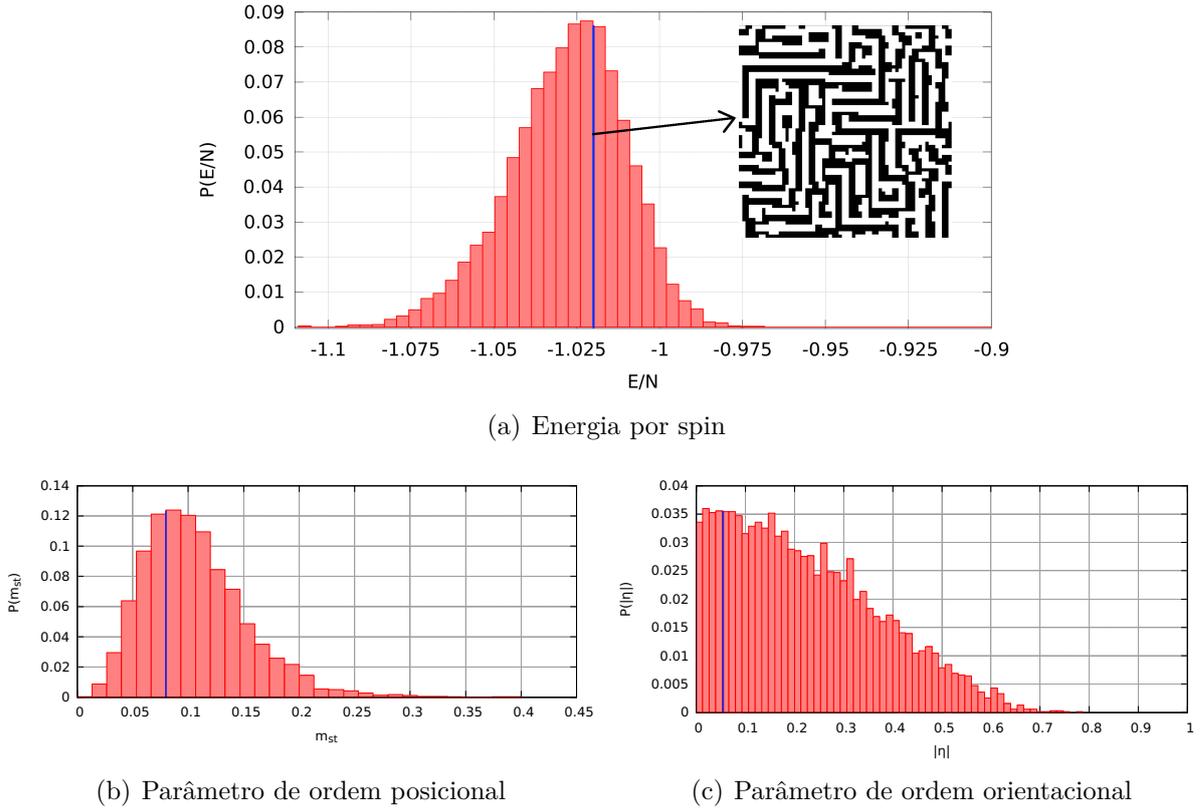


Figura 27 – Distribuições de (a) energia por spin e parâmetros de ordem (b) posicional e (c) orientacional na fase líquido-tetragonal, para  $T = 0.820$ ,  $\delta = 2$  e  $L = 64$ . Em detalhe, a configuração típica da fase líquido-tetragonal. As linhas azuis mostram o valor da energia por spin ( $E/N \approx -1.02$ ) e dos parâmetros de ordem posicional ( $m_{st} \approx 0.081$ ) e orientacional ( $|\eta| \approx 0.055$ ) da configuração típica.

ordem de quase-longo alcance, e ordem de curto alcance. A *ordem de longo alcance* é caracterizada por funções de correlação que decaem a um valor finito não-nulo para longas distâncias. A *ordem de quase-longo alcance* (QLRO, do inglês *Quasi-Long-Range Order*) é marcada por funções de correlação com decaimento algébrico (lei de potência) com a distância. A *ordem de curto alcance* (ou desordem) ocorre quando as funções de correlação decaem a zero para longas distâncias. No presente trabalho, estamos interessados em determinar a presença ou ausência das ordens posicional e orientacional nas fases de equilíbrio do modelo. Para este fim, vamos introduzir as funções de correlação posicionais e orientacionais.

As funções de correlação espaciais nas direções cartesianas são dadas por

$$C_x(r) = \frac{1}{N} \sum_y \sum_x \langle S_{x,y} S_{x+r,y} \rangle, \quad (4.9)$$

e

$$C_y(r) = \frac{1}{N} \sum_y \sum_x \langle S_{x,y} S_{x,y+r} \rangle. \quad (4.10)$$

onde  $S_{x,y}$  é o spin com coordenadas  $(x, y)$ ,  $r$  é a distância e  $N = L^2$  é o número total de spins. No presente trabalho, fixamos a direção cartesiana  $x$  como a direção perpendicular às faixas, e a direção  $y$  como paralela às faixas.

Para definir as funções de correlação orientacionais, introduzimos o campo orientacional local  $O(x, y)$  [57]:

$$O_{x,y} \equiv O(x, y) = \frac{1}{2} S_{x,y} \cdot (S_{(x+h)\%L,y} - S_{x,(y+h)\%L}). \quad (4.11)$$

As funções de correlação orientacionais nas direções cartesianas são então dadas por:

$$C_{\eta,x}(r) = \frac{1}{N} \sum_y \sum_x \langle O_{x,y} O_{x+r,y} \rangle, \quad (4.12)$$

e

$$C_{\eta,y}(r) = \frac{1}{N} \sum_y \sum_x \langle O_{x,y} O_{x,y+r} \rangle. \quad (4.13)$$

O campo orientacional  $O(x, y)$  serve como um parâmetro de ordem orientacional local - ao contrário do parâmetro de ordem orientacional  $\eta$  introduzido na seção 4.1, que quantifica a ordem orientacional global do sistema. Pela definição dessa quantidade, teremos  $O(x, y) = 1$  nas regiões em que as faixas estão ordenadas horizontalmente e  $O(x, y) = -1$  onde as faixas estão ordenadas verticalmente. Nas regiões em que as faixas com diferentes orientações se encontram, temos  $O(x, y) = 0$ .

Com base nos valores de energia e temperatura das distribuições de energia e parâmetros de ordem da seção 4.2.1, nós analisamos o comportamento das funções de correlação nas fases de equilíbrio do sistema. O cálculo das funções de correlação foi realizado simulando uma temperatura por vez apenas com o algoritmo de Metropolis, sem utilizar o algoritmo de *Parallel Tempering*. A média térmica das funções de correlação foi calculada sobre 20 realizações independentes, partindo de uma configuração inicial paramagnética (desordenada), descartando  $10^5$  MCS de regime transiente para termalização e medindo durante  $10^6$  MCS por realização, com parâmetros  $L = 128$ ,  $\delta = 2$  e diferentes temperaturas, correspondendo às diferentes fases de equilíbrio, nominalmente: a fase de faixas de largura  $h = 2$  (Fig. 28), a fase nemática (Fig. 29) e a fase líquido-tetragonal (Fig. 31).

As funções correlação espaciais e orientacionais na fase de faixas (Figs. 28a,b) apresentam um decaimento a um valor constante nas duas direções principais. Esse comportamento indica que essa fase possui ordens posicional e orientacional de longo alcance. A oscilação na direção perpendicular ( $\hat{x}$ ) às faixas na figura (28a) se deve à estrutura da fase de faixas, que consiste em faixas de magnetização alternada. As configurações dos spins (28c) e do campo orientacional (28d) confirmam que esta é uma fase de faixas de largura  $h = 2$ .

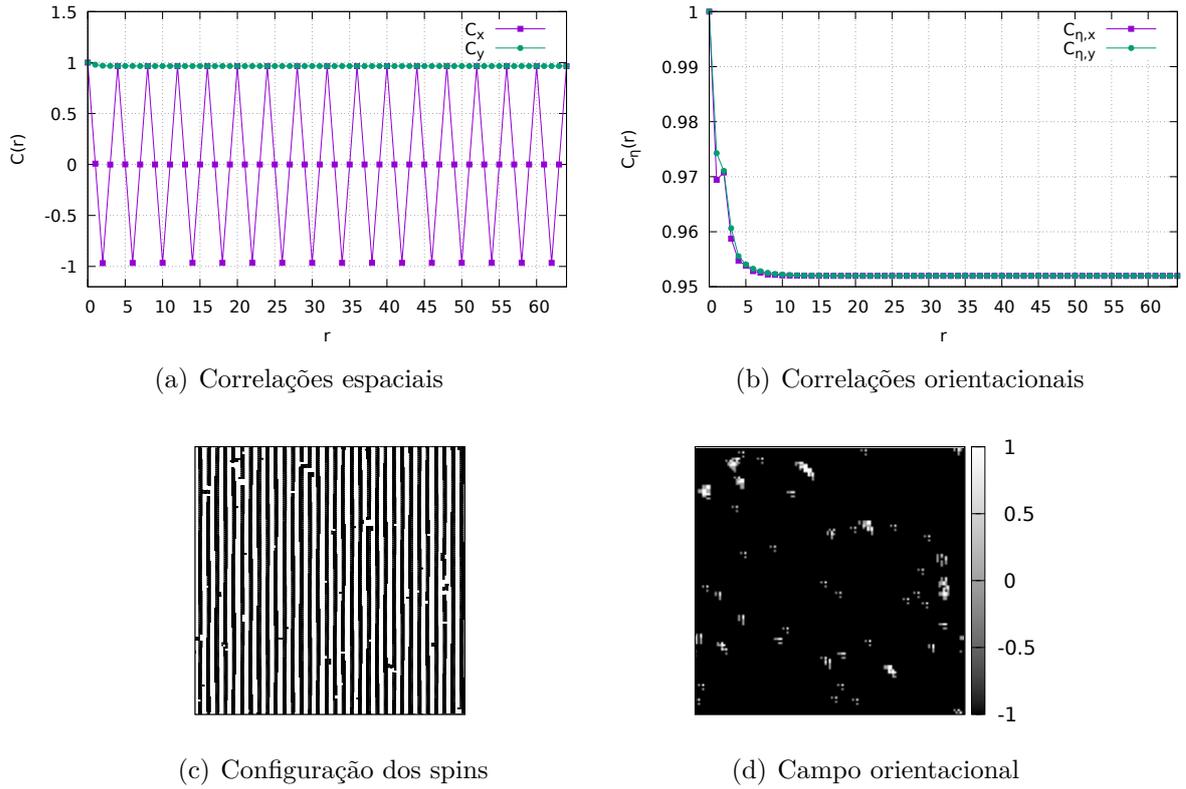


Figura 28 – Funções de correlação (a) espaciais e (b) orientacionais na fase de faixas de largura  $h = 2$ . Configurações finais (c) da rede e (d) do campo orientacional, com parâmetros  $L = 128$ ,  $\delta = 2$  e  $T = 0.760$ .

Na fase nemática, as funções de correlação orientacionais (Fig. 29b) apresentam um decaimento a um valor constante, indicando que essa fase possui ordem orientacional de longo alcance - como é esperado na fase nemática. Vale ressaltar que esse decaimento é mais lento na direção paralela às faixas, o que indica a presença de domínios anisotrópicos, que são mais alongados na direção paralela às faixas. As funções de correlação posicionais (Fig. 29a) na direção perpendicular às faixas ( $x$ ) apresentam um decaimento exponencial a zero, marcado por uma oscilação devido à estrutura de faixas de magnetização alternada. Na direção paralela às faixas ( $y$ ), as correlações espaciais apresentam um decaimento algébrico (lei de potência), que pode ser melhor apreciado na figura 30.

A figura 30 mostra um ajuste para as funções de correlação espaciais na fase nemática. A forma do ajuste foi inspirada no trabalho de Cannas e coautores (2006) [8]. A linha contínua corresponde a um ajuste para a função de correlação espacial na direção perpendicular às faixas utilizando a função  $f(r) = Ae^{-r/\xi} \cos(k_0 r + \phi)$  com parâmetros  $k_0 = 1.47$ ,  $\xi = 51.47$  e  $\phi = 0.03$ . Vale notar que  $k_0 \approx \pi/2$  corresponde ao vetor de onda da fase de faixas com largura  $h = 2$ . O parâmetro  $\xi = 51.47$  pode ser interpretado como um comprimento de correlação, que caracteriza o tamanho típico dos domínios dessa fase na direção perpendicular às faixas. Em detalhe, o gráfico em escala logarítmica das

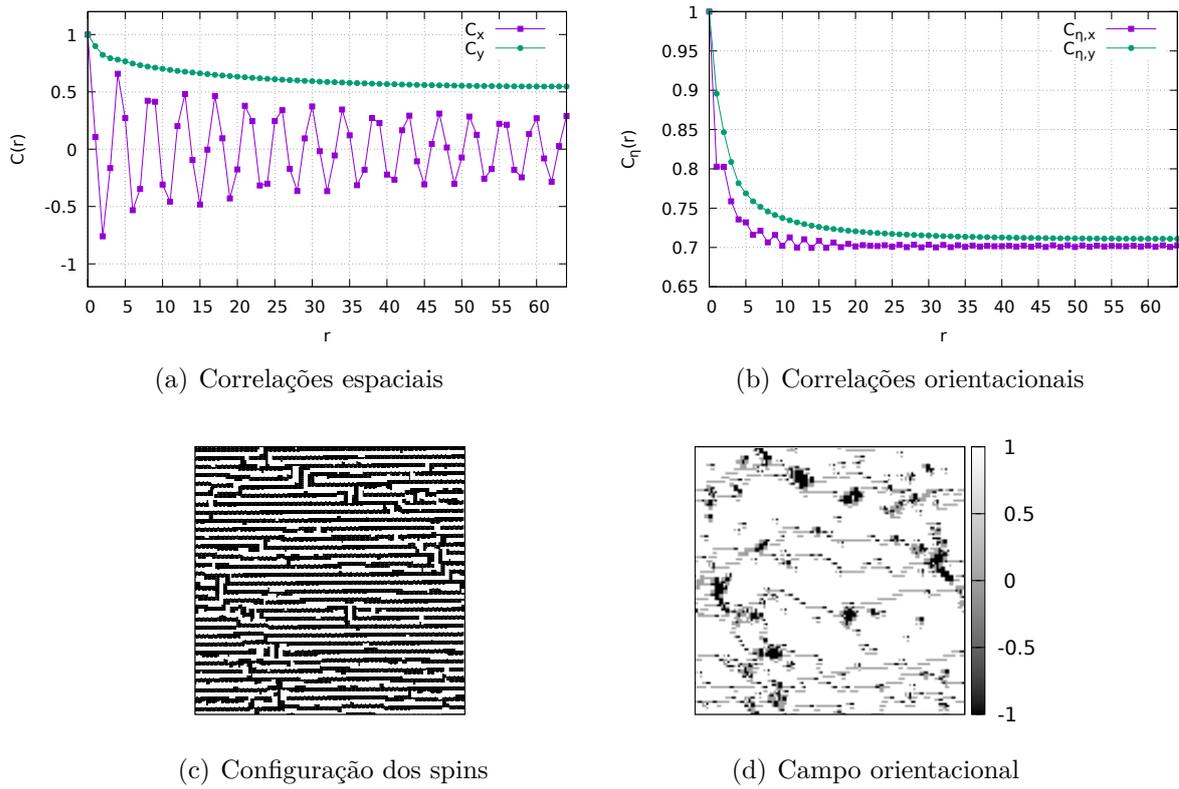


Figura 29 – Funções de correlação (a) espaciais e (b) orientacionais na fase nemática. Configurações finais (c) da rede e (d) do campo orientacional, com parâmetros  $L = 128$ ,  $\delta = 2$  e  $T = 0.790$ . O decaimento das funções de correlação espaciais indica uma ordem posicional de curto alcance. O decaimento das funções de correlação orientacionais para uma constante nas duas direções principais indica a ordem orientacional de longo alcance, que caracteriza a fase nemática.

correlações na direção paralela às faixas mostra que elas decaem como uma lei de potência  $r^{-\omega}$  para distâncias longas, com  $\omega \approx 0.116$ , o que confirma o decaimento algébrico nessa direção.

Na fase líquido-tetragonal, o decaimento das funções de correlação espaciais e orientacionais a zero nas duas direções principais (Figs. 31a,b) indica que as ordens posicional e orientacional são de curto alcance. O campo orientacional (Figs. 31c) mostra a existência de regiões onde as faixas apresentam ordenamento vertical e horizontal, confirmando que essa fase ainda apresenta direções preferenciais para o ordenamento das faixas.

Como podemos ver, tanto as distribuições de energia e parâmetros de ordem quanto as funções de correlação confirmam que o modelo *Ising dipolar* apresenta três fases termodinâmicas distintas com diferentes tipos de ordem, e que essas são as fases de faixas, nemática e líquido-tetragonal. Na seção 4.3, vamos investigar mais a fundo as transições entre essas fases.

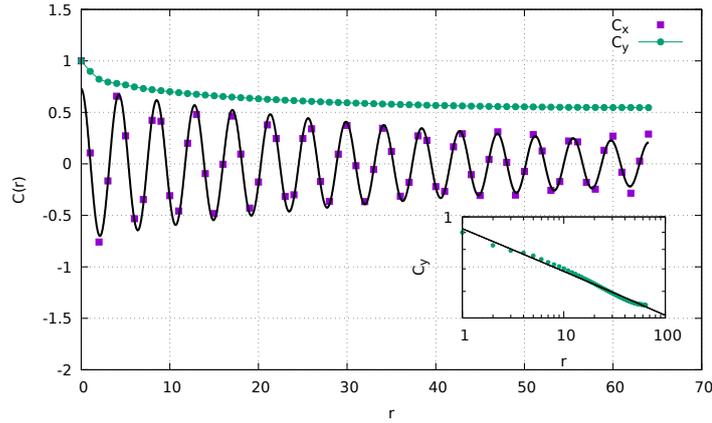


Figura 30 – Funções de correlação espaciais na fase nemática nas direções perpendicular ( $x$ ) e paralela ( $y$ ) às faixas, com  $T = 0.79$ ,  $\delta = 2$  e  $L = 128$ . A linha contínua mostra um ajuste por uma função do tipo  $f(r) = Ae^{-r/\xi} \cos(k_0 r + \phi)$ . Em detalhe, o plot log-log de  $C_y$  mostra um decaimento do tipo lei de potência para longas distâncias  $r^{-\omega}$ , com  $\omega \approx 0.116$ . Os detalhes sobre o ajuste são discutidos no texto.

### 4.3 Análise das Transições de Fase

A coexistência de fases é uma característica particular das transições de fase de primeira ordem. Nas simulações de Monte Carlo, a coexistência se manifesta através da geração de configurações que correspondem às fases distintas existentes logo acima e abaixo da temperatura de transição. A presença de múltiplos picos nas distribuições de energia e parâmetros de ordem é uma forte indicação de uma transição de primeira ordem. Assim, para localizar coexistências de fases em transições aparentemente descontínuas, construímos as distribuições de energia por spin e parâmetros de ordem posicional  $|\eta|$  e orientacional  $m_{st}$  para diferentes temperaturas em torno das regiões de transição.

A dependência das distribuições de energia por spin e parâmetros de ordem com a temperatura pode ser vista na figura 32, para temperaturas na vizinhança das transições faixas-nemática  $T_c^{(1)} \approx 0.772$  e nemática-líquido-tetragonal  $T_c^{(2)} \approx 0.800$ . Como se pode ver, em  $T = 0.773$  as distribuições de energia (Fig. 32a) e de parâmetro de ordem orientacional (Fig. 32c) apresentam pares de picos, o que indica a coexistência de duas fases termodinâmicas distintas. Essa coexistência pode ser melhor apreciada na figura 33. A inspeção das configurações típicas mostra que o pico de menor energia ( $E/N \approx -1.184$ ,  $|\eta| \approx 0.96$ ,  $m_{st} \approx 0.98$ ) corresponde à fase de faixas, e o pico de maior energia ( $E/N \approx -1.14$ ,  $|\eta| \approx 0.85$ ,  $m_{st} \approx 0.17$ ) corresponde à fase nemática. Isso também é confirmado pelas distribuições de parâmetro de ordem posicional (Fig. 32e), que mostram um pico em  $m_{st} \approx 1$  correspondendo a uma fase com ordem posicional, a fase de faixas, e um pico em  $m_{st} \approx 0.2$  correspondendo a uma fase sem ordem posicional, mas que ainda apresenta ordem orientacional (conforme Fig. 32c), consistente com a descrição da fase

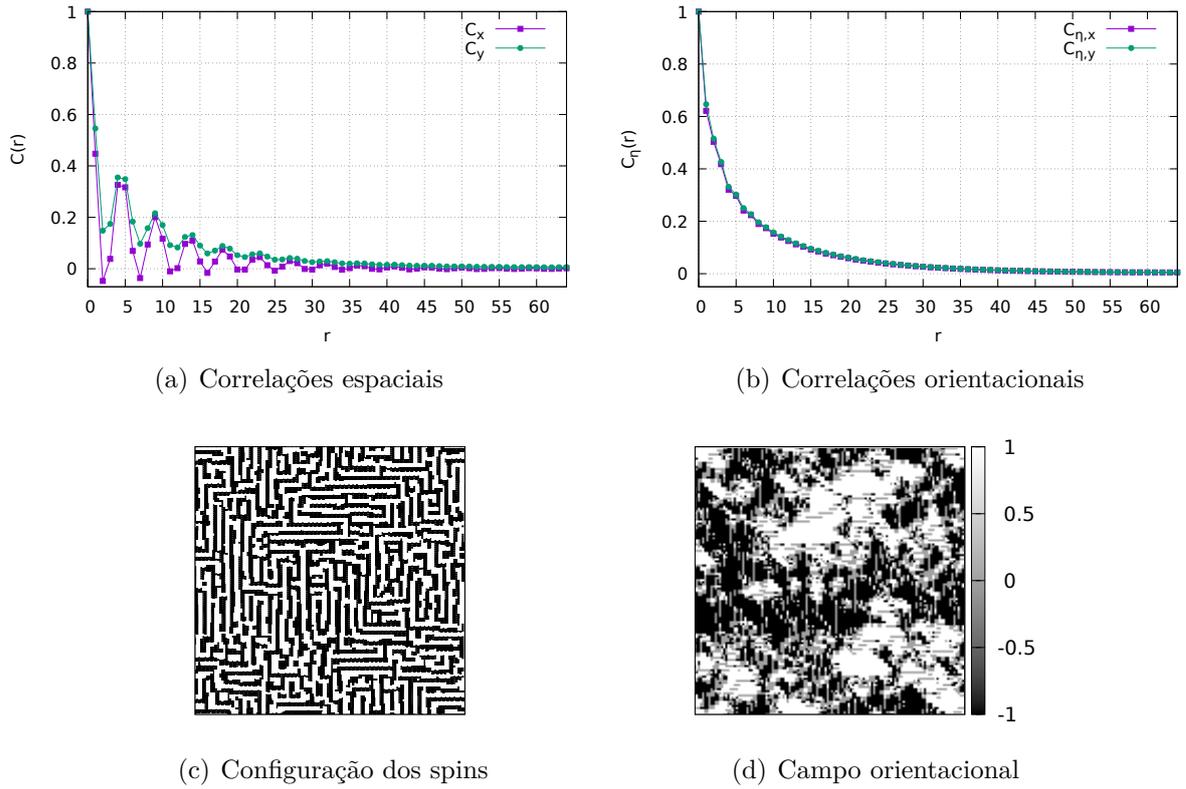


Figura 31 – Funções de correlação (a) espaciais e (b) orientacionais na fase líquido-tetragonal. Configurações finais (c) da rede e (d) do campo orientacional, com parâmetros  $L = 128$ ,  $\delta = 2$  e  $T = 0.820$ .

nemática.

Em  $T = 0.803$ , a distribuição de energia (Fig. 32b) também apresenta dois picos, o que indica a coexistência de fases, podendo ser melhor visualizada na figura 34. A inspeção das configurações típicas mostra que o pico de menor energia ( $E/N \approx -1.122$ ,  $|\eta| \approx 0.81$ ,  $m_{st} \approx 0.14$ ) corresponde à fase nemática, e o pico de maior energia ( $E/N \approx -1.06$ ,  $|\eta| \approx 0.44$ ,  $m_{st} \approx 0.10$ ) corresponde à fase líquido-tetragonal. As distribuições de parâmetro de ordem posicional (Fig. 32f) confirma que essas fases não apresentam ordem posicional, mas as distribuições de parâmetro de ordem orientacional (Fig. 32d) mostram que uma das fases ainda apresenta ordem orientacional - a fase nemática.

Uma discussão pertinente em relação à metodologia escolhida para o presente trabalho é sobre a aplicabilidade do método de *Parallel Tempering* para sistemas com transições de fase de primeira ordem [58]. O método depende crucialmente da sobreposição das distribuições de energia das réplicas com temperaturas vizinhas, e caso essas distribuições apresentem múltiplos picos (como é o caso em transições de fase de primeira ordem), essa sobreposição pode não ocorrer. Para contornar este problema em parte, tentamos tornar as temperaturas bastante próximas umas das outras, de modo que as distribuições de energia apresentassem sobreposições significativas mesmo quando tivessem

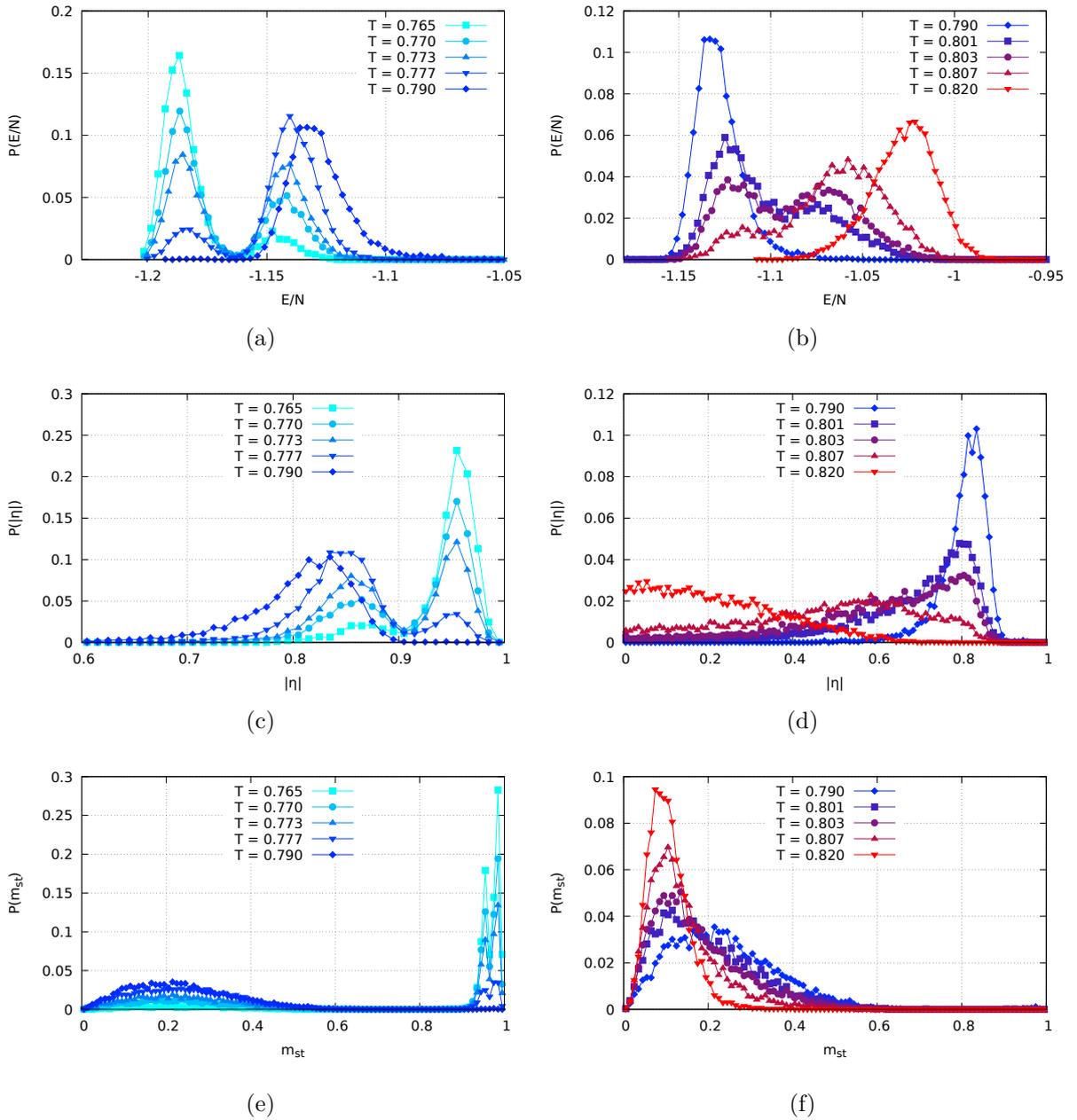


Figura 32 – Distribuições de energia por spin (a,b) e parâmetros de ordem orientacional (c,d) e posicional (e,f) para  $L = 64$ ,  $\delta = 2$  e temperaturas na vizinhança da transição faixas-nemática  $T_c^{(1)} \approx 0.773$  e nemática-líquido-tetragonal  $T_c^{(2)} \approx 0.803$ .

comportamento multimodal. Um exemplo disso pode ser visto nas figuras 32a,b, onde as temperaturas imediatamente próximas (e.g.  $T = 0.770$  e  $T = 0.773$ , ou  $T = 0.801$  e  $T = 0.803$ ) apresentaram sobreposição nos dois picos das distribuições de energia.

A estrutura de dois picos em ambas as transições indica que essas transições de fase são de primeira ordem, e está de acordo com os resultados de simulações de Monte Carlo presentes na literatura [30, 8, 9]. As configurações típicas da fase nemática (Fig. 26) apresentam uma alta densidade de defeitos topológicos (dislocações) na estrutura de faixas

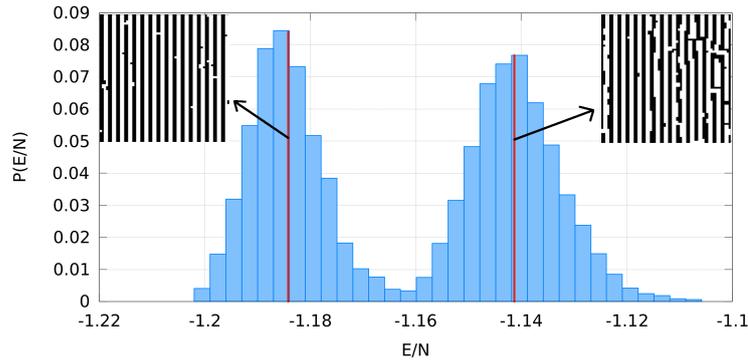


Figura 33 – Coexistência na transição faixas-nemática para  $T = 0.773$  e  $L = 64$ . As configurações típicas são mostradas.

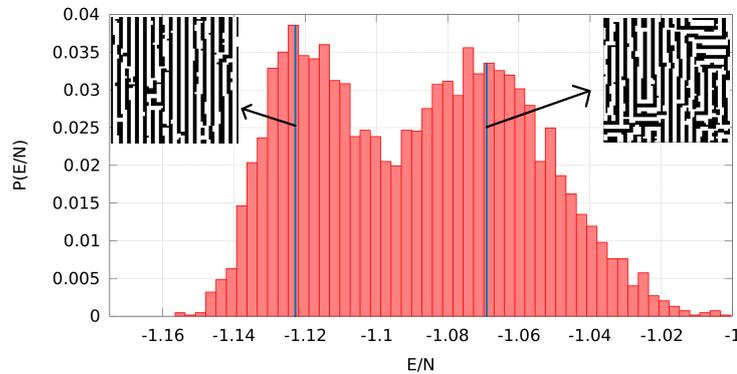


Figura 34 – Coexistência na transição nemática-líquido-tetragonal para  $T = 0.803$  e  $L = 64$ . As configurações típicas são mostradas.

subjacente. Esses defeitos reduzem o valor médio do parâmetro de ordem orientacional, e sua presença está de acordo com a descrição da fase Ising nemática introduzida por Abanov e coautores [4]. Esses tipos de defeitos também foram observados em filmes de Fe/Cu na vizinhança da transição de fase [13].

Na seção que segue 4.3.1, vamos realizar uma análise de escalonamento finito a fim de determinar as temperaturas de transição faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ) utilizando uma forma de escalonamento esperada para transições de fase de primeira ordem.

### 4.3.1 Escalonamento de Tamanho Finito

É um fato bem estabelecido na literatura que simulações de sistemas com tamanhos finitos introduzem desvios sistemáticos do comportamento macroscópico nas transições de fase [51, 52, 48]. Conhecer esses efeitos de tamanho finito é útil pois podemos obter as quantidades termodinâmicas para tamanhos pequenos de sistema e então extrapolar para o limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ).

Transições de fase de primeira ordem são caracterizadas por descontinuidades nas primeiras derivadas da energia livre (e.g. energia interna, magnetização). Isso resulta em singularidades no calor específico e nas susceptibilidades na temperatura de transição. Nesses casos, o comprimento de correlação permanece finito quando nos aproximamos da transição. Essas singularidades associadas às transições de primeira ordem se devem puramente à coexistência de fases, e não há região crítica ou expoentes críticos associados. Em uma transição de primeira ordem,  $L$  aparece apenas por conta do volume  $V = L^d$  em  $d$  dimensões; assim, os máximos crescem com  $L^d$  e o limite da função- $\delta$  é obtido por a largura decresce com  $L^{-d}$ . Vale ressaltar que essas previsões são atingidas apenas no limite  $L \rightarrow \infty$ .

Por outro lado, as transições de fase de segunda ordem possuem divergências intimamente ligadas à divergência do comprimento de correlação. Enquanto as susceptibilidades divergem, o calor específico pode ou não divergir. Quando trabalhamos com um sistema de tamanho finito, essas divergências não ocorrem. Em ambos os tipos de transição, observamos picos finitos no calor específico e na susceptibilidade na vizinhança do ponto de transição. Dois efeitos aparecem por conta do tamanho finito da rede: (i) as alturas dos picos variam com o aumento do tamanho da rede; e (ii) as localização das temperaturas dos máximos também variam com o tamanho do sistema, e essas temperaturas são chamadas de *pseudo-temperaturas críticas*. Analisando o comportamento dessas pseudo-temperaturas críticas com o tamanho do sistema, podemos inferir os valores das temperaturas de transição no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ).

Os resultados a seguir foram obtidos com os dados dos máximos do calor específico e das susceptibilidades e os mínimos dos cumulantes de 4<sup>a</sup> ordem da energia para tamanhos de sistema  $L = 40, 48, 56, 64$ , apresentados na seção 4.1. A tabela 1 reúne os valores das pseudo-temperaturas críticas obtidas pelos máximos do calor específico e mínimos do cumulante de Binder da energia (Fig. 24). A tabela 2 mostra os valores das pseudo-temperaturas críticas obtidas pelos máximos das susceptibilidades dos parâmetros de ordem (Fig. 22).

Em uma transição de primeira ordem, o calor específico diverge como  $L^d$ , e o deslocamento da pseudo-temperatura crítica escala com  $L^{-d}$ . Em uma transição de segunda ordem, o comprimento de correlação é limitado pelo tamanho da rede  $L$ , e a teoria de escalonamento finito prevê que o máximo do calor específico diverge segundo  $L^{\alpha/\nu}$  [49]. No caso de transições de primeira ordem fracas, o tamanho mínimo de uma fase nucleada dentro da outra (coexistência) costuma ser muito maior que o tamanho do sistema.

Como vimos na seção 4.1, o calor específico (Fig. 24(a)) apresenta dois máximos distintos nas pseudo-temperaturas críticas que denotaremos por  $T_1^c(L) < T_2^c(L)$ . Se a transição for de primeira ordem, as pseudo-temperaturas críticas devem escalar da forma

[51, 52]:

$$\begin{aligned} T_1^c(L) &\sim T_1 + \frac{B_1}{L^2}, \\ T_2^c(L) &\sim T_2 + \frac{B_2}{L^2}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde  $T_{1,2}$  são as temperaturas críticas no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ). Propondo um ajuste da forma (4.14) aos dados do calor específico, obtemos que a temperatura de transição faixas-nemática é  $T_1 = 0.766 \pm 0.003$  com  $B_1 = 34 \pm 6$ , enquanto que a temperatura de transição nemática-líquido-tetragonal é  $T_2 = 0.796 \pm 0.001$  com  $B_2 = 36 \pm 3$ .

O cumulante de Binder da energia (Fig. 24(b)) apresenta dois mínimos distintos nas pseudo-temperaturas críticas denotadas por  $T_1^v(L) < T_2^v(L)$ . Propondo um ajuste do tipo (4.14) aos dados do cumulante de Binder, obtemos que a temperatura de transição faixas-nemática é  $T_1 = 0.766 \pm 0.002$  com  $B_1 = 36 \pm 6$ , e a temperatura de transição nemática-líquido-tetragonal é  $T_2 = 0.795 \pm 0.001$  e  $B_2 = 40 \pm 3$ .

Tabela 1 – Pseudo-temperaturas críticas  $T_1^c(L)$  e  $T_2^c(L)$  ( $T_1^v(L), T_2^v(L)$ ) obtidas através dos máximos (mínimos) de menor e maior temperatura do calor específico (cumulante de Binder), respectivamente.

L	$T_1^c(L)$	$T_2^c(L)$	$T_1^v(L)$	$T_2^v(L)$
40	0.786548	0.817747	0.787604	0.819998
48	0.781609	0.812113	0.782257	0.813413
56	0.778172	0.807789	0.778573	0.808445
64	0.772567	0.803811	0.772939	0.804325

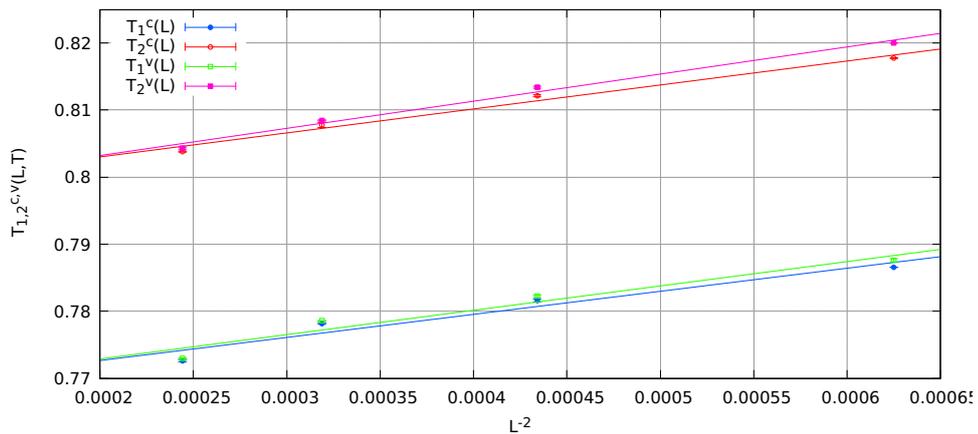


Figura 35 – Escalonamento de tamanho finito dos máximos do calor específico e mínimos do cumulante de Binder. As barras de erro foram obtidas considerando um ajuste parabólico em torno dos máximos/mínimos.

Como vimos na seção 4.1, a susceptibilidade posicional (Fig. 22(a)) apresenta um máximo na pseudo-temperatura crítica que denotaremos por  $T_1^{mst}(L)$ , enquanto que a

susceptibilidade orientacional (Fig. 22(b)) apresenta um máximo na pseudo-temperatura crítica denotada por  $T_2^X(L)$ . A tabela 2 mostra os valores das pseudo-temperaturas críticas  $T_1^{mst}(L)$  e  $T_2^X(L)$  para os diferentes tamanhos de sistema analisados. Propondo um ajuste da forma (4.14) aos dados, obtemos que a temperatura de transição faixas-nemática se dá em  $T_1 = 0.766 \pm 0.003$  com  $B_1 = 33 \pm 6$ , enquanto que a temperatura de transição nemática-líquido-tetragonal se dá em  $T_2 = 0.800 \pm 0.001$  com  $B_2 = 29 \pm 1$ . Esse ajuste para as susceptibilidades pode ser visto na figura 36.

Tabela 2 – Pseudo-temperaturas críticas  $T_1^{mst}(L)$  e  $T_2^X(L)$  obtidas através dos máximos das susceptibilidades posicional e orientacional, respectivamente.

L	$T_1^{mst}(L)$	$T_2^X(L)$
40	0.785806	0.818216
48	0.781045	0.813069
56	0.777998	0.809372
64	0.772449	0.807423

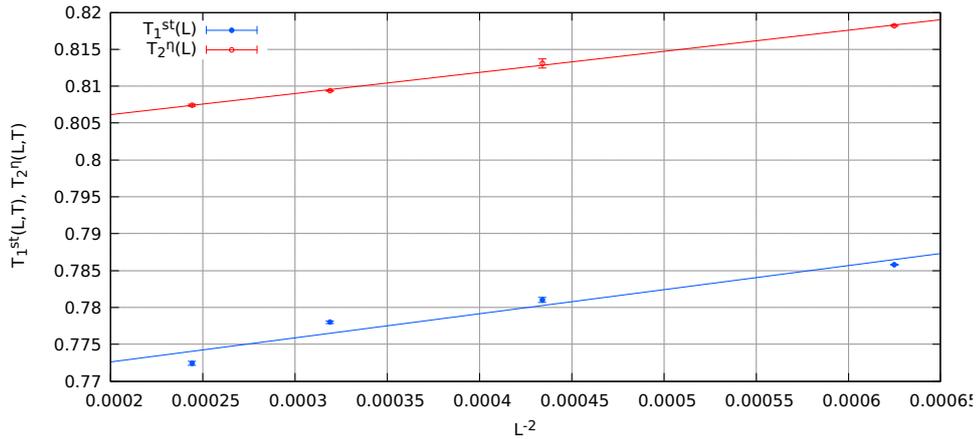


Figura 36 – Escalonamento de tamanho finito dos máximos das susceptibilidades posicional e orientacional. As barras de erro foram obtidas considerando um ajuste parabólico em torno dos máximos.

A tabela 3 reúne os valores das temperaturas de transição faixas-nemática  $T_1$  e nemática-líquido-tetragonal  $T_2$  obtidas pela análise de escalonamento finito das diferentes quantidades, bem como aquela obtida pelo cruzamento dos cumulantes orientacionais (Fig. 23(b)). Como podemos ver, a temperatura de transição obtida através do pico de menor temperatura do calor específico concorda com a temperatura obtida através do pico da susceptibilidade posicional dentro das barras de erro. Essa temperatura  $T_1 \approx 0.766$  está associada à perda da ordem posicional da fase de faixas, resultando num estado apenas com ordem orientacional, correspondendo à fase nemática. A temperatura de transição obtida através do pico de maior temperatura do calor específico também concorda com a temperatura obtida através do pico da susceptibilidade orientacional dentro das barras de

Tabela 3 – Temperaturas das transições faixas-nemática  $T_1$  e nemática-líquido-tetragonal  $T_2$  obtidas através das análises de escalonamento finito do calor específico  $C(L, T)$ , do cumulante de Binder da energia  $V_e(L, T)$ , das susceptibilidades posicional  $\chi_{m_{st}}(L, T)$  e orientacional  $\chi_\eta(L, T)$  e do cruzamento dos cumulantes orientacionais  $V_\eta(L, T)$ .

Quantidade	$T_1$	$T_2$
$C(L, T)$	$0.766 \pm 0.003$	$0.796 \pm 0.001$
$V_e(L, T)$	$0.766 \pm 0.002$	$0.795 \pm 0.001$
$\chi_{m_{st}}(L, T)$	$0.766 \pm 0.003$	-
$\chi_\eta(L, T)$	-	$0.800 \pm 0.001$
Cruzamento $V_\eta(L, T)$	-	0.800

erro. Essa temperatura  $T_2 \approx 0.795$  está associada à perda da ordem orientacional da fase nemática, resultando na fase líquido-tetragonal. O escalonamento finito da susceptibilidade orientacional leva a um valor de  $T_2$  similar àquele obtido através do máximo (mínimo) de maior temperatura do calor específico (cumulante de Binder). Esse comportamento é consistente com uma transição de fase de primeira ordem [52, 8].

Nossos resultados mostram que a fase nemática existe no limite termodinâmico em uma faixa estreita de temperaturas  $0.766(3) \leq T \leq 0.800(1)$ . No entanto, é um fato conhecido na literatura [51, 52, 48] que a temperatura de transição obtida pela análise do escalonamento finito pode ser sensível ao menor tamanho do sistema utilizado nos dados do ajuste. Os valores das temperaturas de transição obtidas através da nossa análise de escalonamento finito do calor específico, do cumulante de Binder e das susceptibilidades estão de acordo com aqueles obtidos por Cannas e coautores (2006) [8] na extrapolação para  $L \rightarrow \infty$ , nominalmente  $T_1 = 0.772 \pm 0.002$  e  $T_2 = 0.797 \pm 0.005$ . Esses valores também estão de acordo com as temperaturas de transição obtidas por Bab e coautores (2019) [10], nominalmente  $T_1 = 0.774$  e  $T_2 = 0.800$ .

Quanto à natureza das transições de fase, nossos resultados apresentam evidências conflitantes. A presença de pares de picos nas distribuições de energia nas transições faixas-nemática (Fig. 34) e nemática-líquido-tetragonal (Fig. 33) indica a coexistência de fases, sugerindo que ambas transições são de primeira ordem. As análises de escalonamento finito das diferentes quantidades também são consistentes com transições de primeira ordem. O comportamento não-monotônico dos cumulantes de Binder da energia (Fig. 24(b)) e do parâmetro de ordem posicional (Fig. 23(a)) também sugerem uma transição de primeira ordem. No entanto, o fato de os mínimos do cumulante de Binder da energia (Fig. 24(b)) e do parâmetro de ordem posicional (Fig. 23(a)) se tornarem mais rasos com o aumento do tamanho do sistema é uma característica incomum para uma transição de primeira ordem, e pode ser devido a efeitos de tamanho finito das simulações. A saturação do pico de menor temperatura do calor específico sugere a possibilidade de uma transição KT. Além disso, o cruzamento dos cumulantes orientacionais (Fig. 23(b)) sugere que a

transição de fase nemática-líquido-tetragonal é de segunda ordem, o que é conflitante com a coexistência observada nessa transição (Fig. 34). Por conta disso, nossos resultados ainda não nos permitem extrair uma conclusão definitiva a respeito da natureza das transições, e a simulação de sistemas maiores permanece necessária para produzir uma análise de escalonamento de tamanho finito confiável.

## 5 Conclusão

Neste trabalho, investigamos um modelo microscópico simples para filmes magnéticos ultrafinos com forte anisotropia perpendicular ao plano do filme - o modelo *Ising dipolar*. Os filmes magnéticos ultrafinos são materiais praticamente bidimensionais, e apresentam uma anisotropia superficial que força os momentos magnéticos do material a se orientarem perpendicularmente ao plano do filme - o chamado *limite ultrafino*. Nesse limite, os momentos magnéticos podem ser tratados como variáveis de Ising, que assumem apenas duas orientações perpendiculares ao plano do filme:  $+1$  (*spin up*) ou  $-1$  (*spin down*). Por conta disso, o modelo *Ising dipolar* foi sugerido como um modelo mínimo que captura alguns dos fenômenos que esses filmes apresentam, como a competição de interações, a frustração e a formação de padrões. Esse modelo já foi alvo de longas investigações desde a década de 1990, e apesar disso, algumas questões a respeito do seu diagrama de fases permanecem em aberto - em especial, aquelas que se referem à natureza das transições de fase.

Algumas formas de investigar esse modelo são através da aproximação de campo médio [9, 40] e das simulações de Monte Carlo [30, 8, 9, 46, 10]. Na aproximação de campo médio, as fases de equilíbrio são as fases de faixas, “faixas híbridas” e paramagnética. No limite dessa aproximação, o sistema apresenta uma única transição de segunda ordem entre a fase de faixas e a fase paramagnética. Sistemas bidimensionais apresentam flutuações particularmente fortes, e como a aproximação de campo médio despreza essas flutuações, isso introduz mudanças qualitativas no comportamento do modelo - por exemplo, essa aproximação não consegue detectar as fases nemática e líquido-tetragonal [9, 40]. Por esse motivo, escolhemos estudar o modelo *Ising dipolar* através das simulações de Monte Carlo.

As simulações de Monte Carlo revelam um diagrama de fases complexo, com estados fundamentais que apresentam diferentes tipos de ordenamento. Dependendo do valor da razão entre as interações de troca e dipolar  $\delta = J/g$ , o estado fundamental pode ser antiferromagnético ou dado por faixas de magnetização alternada caracterizadas por uma largura  $h(\delta)$  que cresce exponencialmente com o parâmetro  $\delta$  [2]. Em algumas regiões onde a aproximação de campo médio prevê estados de “faixas híbridas” [9, 40], as simulações de Monte Carlo apresentam fases nemáticas [8, 9, 46, 10]. Dependendo do valor de  $\delta$ , a passagem entre a fase de faixas e a fase líquido-tetragonal pode apresentar diferentes comportamentos [8, 46]. Em um deles, observa-se uma única transição entre essas fases, sem a presença uma fase nemática intermediária. Para outros valores de  $\delta$ , observa-se outro comportamento, com duas transições de fase que ocorrem em temperaturas distintas, com a presença de uma fase nemática intermediária [4]. Alguns estudos sugerem que as transições de fase faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal podem ser do tipo KT,

mediadas por defeitos topológicos [8, 10]. A natureza das transições de fase faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal permanece uma questão em aberto, e um dos objetivos deste trabalho foi a investigação e caracterização dessas transições.

A investigação do modelo *Ising dipolar* através de simulações de Monte Carlo é dificultada devido ao caráter de longo alcance da interação dipolar, que envolve o cálculo das interações entre todos os pares distintos de spins, atribuindo uma complexidade  $\mathcal{O}(N^2)$  ao seu cálculo, onde  $N$  denota o número de spins no sistema. Além disso, a presença da interação dipolar torna o sistema inerentemente frustrado, isto é, incapaz de satisfazer simultaneamente todas as interações às quais está sujeito. Assim, a frustração, aliada à presença de uma grande quantidade de estados metaestáveis, dificulta a relaxação do sistema para o estado fundamental, resultando em grandes tempos de equilíbrio, tornando as simulações longas e lentas. Essas complicações limitam severamente os tamanhos de sistemas que podem ser investigados na prática, dificultando as análises de escalonamento finito para o modelo.

Nosso estudo se ocupou em caracterizar as fases de equilíbrio do modelo e as transições entre essas fases. Para este fim, realizamos simulações de Monte Carlo do modelo *Ising dipolar* utilizando o método de *Parallel Tempering*. As simulações foram feitas com o algoritmo de Metropolis em redes quadradas de lado  $L$  com condições de contorno periódicas tratadas através da convenção da mínima imagem. Nosso estudo se concentrou na região do diagrama de fases com  $\delta = 2$ , que corresponde a um estado fundamental de faixas de largura  $h = 2$ . Esse valor pequeno de  $\delta$  se encontra longe do limite experimental ( $\delta \gg 1$ ), mas pode dar uma luz sobre o comportamento do modelo em outras regiões do diagrama de fases.

A principal contribuição do presente trabalho está no método utilizado para as simulações do modelo, o *Parallel Tempering* [7]. Esse método tenta contornar os problemas de termalização associados à frustração e à metaestabilidade através da simulação independente e simultânea de um determinado número de sistemas em diferentes temperaturas, eventualmente propondo trocas de temperaturas entre esses sistemas. Essas trocas de temperaturas têm como objetivo ajudar na termalização dos sistemas em baixas temperaturas. Esse método foi aplicado com sucesso na simulação de outros sistemas que apresentam frustração ou dinâmica lenta, como o modelo J1-J2 e vidros de spin. Até onde os autores do presente trabalho sabem, o método de *Parallel Tempering* aplicado ao estudo do modelo *Ising dipolar* ainda não foi reportado na literatura.

Nossos resultados mostram que o modelo *Ising dipolar* apresenta três fases de equilíbrio distintas: a fase de faixas, a fase nemática e a fase líquido-tetragonal. Os tipos de ordenamento em cada fase foram determinados através das distribuições de equilíbrio da energia e dos parâmetros de ordem posicional e orientacional, bem como das funções de correlação espaciais e orientacionais em cada fase. Através do comportamento dos

momentos da energia e dos parâmetros de ordem, fomos capazes de identificar duas transições de fase em temperaturas distintas. Realizando uma análise de escalonamento finito desses momentos, conseguimos determinar as temperaturas das transições faixas-nemática ( $T_1 = 0.766(3)$ ) e nemática-líquido-tetragonal ( $T_2 = 0.800(1)$ ), confirmando a estabilidade da fase nemática no limite termodinâmico  $L \rightarrow \infty$  em uma faixa estreita de temperaturas  $T_1 \leq T \leq T_2$ . Nossos valores para as temperaturas de transição estão de acordo com outros valores reportados na literatura [8, 10].

A respeito da natureza das transições de fase faixas-nemática e nemática-líquido-tetragonal, nossos resultados apresentam evidências conflitantes. Por um lado, a coexistência de fases e a forma do escalonamento finito dos momentos da energia e dos parâmetros de ordem em ambas as transições são consistentes com uma transição de primeira ordem. No entanto, o escalonamento finito do cumulante de Binder da energia e do parâmetro de ordem posicional apresentaram características pouco usuais para uma transição de primeira ordem. Em especial, a saturação do calor específico na transição faixas-nemática sugere a possibilidade dessa transição ser do tipo KT. Além disso, o cruzamento dos cumulantes orientacionais na temperatura  $T_2 \approx 0.800$  sugere que a transição nemática-líquido-tetragonal é de segunda ordem. Uma possível maneira de investigar se a transição faixas-nemática é de primeira ordem ou de primeira ordem fraca é através do método de Lee-Kosterlitz [52], que se baseia na análise do escalonamento da barreira de energia livre entre as duas fases com o tamanho do sistema. Acreditamos que algumas dessas características pouco usuais se devem aos fortes efeitos de tamanho finito nas simulações. Por conta dessas complicações, ainda não podemos concluir que essas transições são de fato de primeira ordem, e o estudo de sistemas com tamanhos maiores ainda se faz necessário para determinar a natureza dessas transições.

A simulação de sistemas grandes é dificultada devido à complexidade  $\mathcal{O}(N^2)$  do cálculo da interação dipolar e os longos tempos de equilíbrio para os sistemas de baixas temperaturas, devido aos efeitos frustração e metaestabilidade. Como vimos no presente trabalho, o método de *Parallel Tempering* ajudou a contornar, pelo menos em parte, os problemas de equilíbrio desses sistemas. Uma possível otimização para o cálculo da interação dipolar é a utilização de métodos hierárquicos [59, 60, 61], que podem reduzir a complexidade para  $\mathcal{O}(N \log N)$ . Acreditamos que a otimização do cálculo da interação dipolar, em conjunto com um método que ajude na termalização dos sistemas de baixas temperaturas, como o *Parallel Tempering*, podem constituir um caminho para a investigação de sistemas com tamanhos ainda maiores, que ajudarão a esclarecer a natureza das transições de fase no modelo *Ising dipolar*.

# Bibliografia

- [1] Michael Seul e David Andelman. “Domain Shapes and Patterns: The Phenomenology of Modulated Phases”. Em: *Science* 267.5197 (jan. de 1995), pp. 476–483. DOI: [10.1126/science.267.5197.476](https://doi.org/10.1126/science.267.5197.476). eprint: <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.267.5197.476>. URL: <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.267.5197.476>.
- [2] K. De’Bell, A. B. MacIsaac e J. P. Whitehead. “Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems”. Em: *Rev. Mod. Phys.* 72 (1 jan. de 2000), pp. 225–257. DOI: [10.1103/RevModPhys.72.225](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.72.225). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.72.225>.
- [3] Alejandro Mendoza-Coto, Daniel A. Stariolo e Lucas Nicolao. “Nature of Long-Range Order in Stripe-Forming Systems with Long-Range Repulsive Interactions”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 114 (11 mar. de 2015), p. 116101. DOI: [10.1103/PhysRevLett.114.116101](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.116101). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.116101>.
- [4] Ar. Abanov et al. “Phase diagram of ultrathin ferromagnetic films with perpendicular anisotropy”. Em: *Phys. Rev. B* 51 (2 jan. de 1995), pp. 1023–1038. DOI: [10.1103/PhysRevB.51.1023](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.1023). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.1023>.
- [5] S. Brazovskii. “Phase Transition of an Isotropic System to a Nonuniform State - JETP 41, 85 (1975)”. Em: *Soviet Phys JETP*. 41 (jan. de 1996).
- [6] Katherine J. Strandburg. “Two-dimensional melting”. Em: *Rev. Mod. Phys.* 60 (1 jan. de 1988), pp. 161–207. DOI: [10.1103/RevModPhys.60.161](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.60.161). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.60.161>.
- [7] Koji Hukushima e Koji Nemoto. “Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations”. Em: *Journal of the Physical Society of Japan* 65.6 (1996), pp. 1604–1608. DOI: [10.1143/JPSJ.65.1604](https://doi.org/10.1143/JPSJ.65.1604). eprint: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.65.1604>. URL: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.65.1604>.
- [8] Sergio A. Cannas et al. “Ising nematic phase in ultrathin magnetic films: A Monte Carlo study”. Em: *Phys. Rev. B* 73 (18 mai. de 2006), p. 184425. DOI: [10.1103/PhysRevB.73.184425](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.184425). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.184425>.
- [9] Santiago A. Pighín e Sergio A. Cannas. “Phase diagram of an Ising model for ultrathin magnetic films: Comparing mean field and Monte Carlo predictions”. Em: *Phys. Rev. B* 75 (22 jun. de 2007), p. 224433. DOI: [10.1103/PhysRevB.75.224433](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.224433). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.224433>.

- [10] M. A. Bab e G. P. Saracco. “Evidence of Kosterlitz-Thouless phase transitions in the Ising model with dipolar interactions”. Em: *Phys. Rev. E* 100 (2 ago. de 2019), p. 022143. DOI: [10.1103/PhysRevE.100.022143](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.022143). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.100.022143>.
- [11] Oliver Portmann, A. Vaterlaus e Danilo Pescia. “An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films”. Em: *Nature* 422 (2003), pp. 701–704. DOI: [DOI: 10.1038/nature01538](https://doi.org/10.1038/nature01538). URL: <https://www.nature.com/articles/nature01538>.
- [12] H.T. Diep. *Magnetic Systems with Competing Interactions: Frustrated Spin Systems*. G - Reference, Information and Interdisciplinary Subjects Series. World Scientific, 1994. ISBN: 9789810217150. URL: <https://books.google.com.br/books?id=9TBqDQAAQBAJ>.
- [13] A. Vaterlaus et al. “Two-Step Disorder of Perpendicularly Magnetized Ultrathin Films”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 84 (10 mar. de 2000), pp. 2247–2250. DOI: [10.1103/PhysRevLett.84.2247](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.2247). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.2247>.
- [14] Elena Vedmedenko. *Competing Interactions and Pattern Formation in Nanoworld*. Weinheim: Wiley-VCH, 2007. URL: <https://cds.cern.ch/record/1320700>.
- [15] D. P. Pappas, K.-P. Kämper e H. Hopster. “Reversible transition between perpendicular and in-plane magnetization in ultrathin films”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 64 (26 jun. de 1990), pp. 3179–3182. DOI: [10.1103/PhysRevLett.64.3179](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.3179). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.64.3179>.
- [16] D. Pescia et al. “Magnetism of Epitaxial fcc Iron Films on Cu(001) Investigated by Spin-Polarized Photoelectron Emission”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 58 (20 mai. de 1987), pp. 2126–2129. DOI: [10.1103/PhysRevLett.58.2126](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2126). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58.2126>.
- [17] R. Allenspach, M. Stambanoni e A. Bischof. “Magnetic domains in thin epitaxial Co/Au(111) films”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 65 (26 dez. de 1990), pp. 3344–3347. DOI: [10.1103/PhysRevLett.65.3344](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.3344). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.65.3344>.
- [18] N. Saratz et al. “Experimental Phase Diagram of Perpendicularly Magnetized Ultrathin Ferromagnetic Films”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 104 (7 fev. de 2010), p. 077203. DOI: [10.1103/PhysRevLett.104.077203](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.077203). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.077203>.
- [19] J. G. Gay e Roy Richter. “Spin Anisotropy of Ferromagnetic Films”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 56 (25 jun. de 1986), pp. 2728–2731. DOI: [10.1103/PhysRevLett.56.2728](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.2728). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.2728>.

- [20] W. Heisenberg. “Zur Theorie des Ferromagnetismus”. Em: *Zeitschrift fur Physik* 49.9-10 (set. de 1928), pp. 619–636. DOI: [10.1007/BF01328601](https://doi.org/10.1007/BF01328601).
- [21] J. H. van Vleck. “On the Anisotropy of Cubic Ferromagnetic Crystals”. Em: *Phys. Rev.* 52 (11 dez. de 1937), pp. 1178–1198. DOI: [10.1103/PhysRev.52.1178](https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.1178). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.1178>.
- [22] Louis Néel. “Anisotropie magnétique superficielle et surstructures d’orientation”. Em: *Journal De Physique Et Le Radium* 15.4 (1954), pp. 225–239. DOI: [10.1051/JPHYSRAD:01954001504022500](https://doi.org/10.1051/JPHYSRAD:01954001504022500).
- [23] T. Garel e S. Doniach. “Phase transitions with spontaneous modulation-the dipolar Ising ferromagnet”. Em: *Phys. Rev. B* 26 (1 jul. de 1982), pp. 325–329. DOI: [10.1103/PhysRevB.26.325](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.26.325). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.26.325>.
- [24] Y. Yafet e E. M. Gyorgy. “Ferromagnetic strip domains in an atomic monolayer”. Em: *Phys. Rev. B* 38 (13 nov. de 1988), pp. 9145–9151. DOI: [10.1103/PhysRevB.38.9145](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.9145). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.38.9145>.
- [25] B. Kaplan e G.A. Gehring. “The domain structure in ultrathin magnetic films”. Em: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 128.1 (1993), pp. 111–116. ISSN: 0304-8853. DOI: [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(93\)90863-W](https://doi.org/10.1016/0304-8853(93)90863-W). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/030488539390863W>.
- [26] A. B. MacIsaac et al. “Striped phases in two-dimensional dipolar ferromagnets”. Em: *Phys. Rev. B* 51 (22 jun. de 1995), pp. 16033–16045. DOI: [10.1103/PhysRevB.51.16033](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.16033). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.16033>.
- [27] R Czech e J Villain. “Instability of two-dimensional Ising ferromagnets with dipole interactions”. Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 1.3 (jan. de 1989), p. 619. DOI: [10.1088/0953-8984/1/3/013](https://doi.org/10.1088/0953-8984/1/3/013). URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/1/3/013>.
- [28] I. Booth et al. “Domain Structures in Ultrathin Magnetic Films”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 75 (5 jul. de 1995), pp. 950–953. DOI: [10.1103/PhysRevLett.75.950](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.950). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.950>.
- [29] Pablo M. Gleiser, Francisco A. Tamarit e Sergio A. Cannas. “Metastable states in a two-dimensional Ising model with dipolar interactions”. Em: *Physica D: Non-linear Phenomena* 168-169 (2002). VII Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena, pp. 73–79. ISSN: 0167-2789. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0167-2789\(02\)00496-7](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(02)00496-7). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167278902004967>.

- [30] Sergio A. Cannas, Daniel A. Stariolo e Francisco A. Tamarit. “Stripe-tetragonal first-order phase transition in ultrathin magnetic films”. Em: *Phys. Rev. B* 69 (9 mar. de 2004), p. 092409. DOI: [10.1103/PhysRevB.69.092409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.092409). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.092409>.
- [31] Alessandro Giuliani, Joel L. Lebowitz e Elliott H. Lieb. “Ising models with long-range antiferromagnetic and short-range ferromagnetic interactions”. Em: *Phys. Rev. B* 74 (6 ago. de 2006), p. 064420. DOI: [10.1103/PhysRevB.74.064420](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.064420). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.064420>.
- [32] C. Domb, M.S. Green e J.L. Lebowitz. *Phase Transitions and Critical Phenomena*. Phase Transitions and Critical Phenomena v. 7. Academic Press, 1983. ISBN: 9780122203077. URL: <https://books.google.com.br/books?id=MJ8mAAAAAAAJ>.
- [33] J M Kosterlitz e D J Thouless. “Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems”. Em: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 6.7 (abr. de 1973), p. 1181. DOI: [10.1088/0022-3719/6/7/010](https://doi.org/10.1088/0022-3719/6/7/010). URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/6/7/010>.
- [34] David R. Nelson e B. I. Halperin. “Dislocation-mediated melting in two dimensions”. Em: *Phys. Rev. B* 19 (5 mar. de 1979), pp. 2457–2484. DOI: [10.1103/PhysRevB.19.2457](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.19.2457). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.19.2457>.
- [35] A. P. Young. “Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions”. Em: *Phys. Rev. B* 19 (4 fev. de 1979), pp. 1855–1866. DOI: [10.1103/PhysRevB.19.1855](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.19.1855). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.19.1855>.
- [36] J. Toner e D.R. Nelson. “Smectic, cholesteric, and Rayleigh-Benard order in two dimensions”. Em: *Physical Review B* 23.1 (1981), p. 316. URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.23.316>.
- [37] L. D. Landau. “On the theory of phase transitions”. Em: *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 7 (1937). Ed. por D. ter Haar, pp. 19–32. DOI: [10.1016/B978-0-08-010586-4.50034-1](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-010586-4.50034-1).
- [38] B. I. Halperin e David R. Nelson. “Theory of Two-Dimensional Melting”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 41 (2 jul. de 1978), pp. 121–124. DOI: [10.1103/PhysRevLett.41.121](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.41.121). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.41.121>.
- [39] A. Kashuba e V. L. Pokrovsky. “Stripe domain structures in a thin ferromagnetic film”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 70 (20 mai. de 1993), pp. 3155–3158. DOI: [10.1103/PhysRevLett.70.3155](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.3155). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.70.3155>.
- [40] Santiago Alberto Pighín. “Comportamiento crítico de láminas ferromagnéticas ultradelgadas”. Tese de dout. Universidad Nacional de Córdoba, 2009.
- [41] P. M. Chaikin e T. C. Lubensky. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 1995. DOI: [10.1017/CB09780511813467](https://doi.org/10.1017/CB09780511813467).

- [42] Walter Selke e Michael E. Fisher. “Monte Carlo study of the spatially modulated phase in an Ising model”. Em: *Phys. Rev. B* 20 (1 jul. de 1979), pp. 257–265. DOI: [10.1103/PhysRevB.20.257](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.20.257). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.20.257>.
- [43] E. Rastelli, S. Regina e A. Tassi. “Phase transitions in a square Ising model with exchange and dipole interactions”. Em: *Phys. Rev. B* 73 (14 abr. de 2006), p. 144418. DOI: [10.1103/PhysRevB.73.144418](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.144418). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.144418>.
- [44] M. A. Bab et al. “Phase transitions and multicritical behavior in the Ising model with dipolar interactions”. Em: *Phys. Rev. E* 94 (4 out. de 2016), p. 042104. DOI: [10.1103/PhysRevE.94.042104](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.042104). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.94.042104>.
- [45] Leandro G. Rizzi e Nelson A. Alves. “Phase transitions and autocorrelation times in two-dimensional Ising model with dipole interactions”. Em: *Physica B: Condensed Matter* 405.6 (2010), pp. 1571–1579. ISSN: 0921-4526. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physb.2009.12.041>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452609015130>.
- [46] Jacyana S. M. Fonseca, Leandro G. Rizzi e Nelson A. Alves. “Stripe-tetragonal phase transition in the two-dimensional Ising model with dipole interactions: Partition function zeros approach”. Em: *Phys. Rev. E* 86 (1 jul. de 2012), p. 011103. DOI: [10.1103/PhysRevE.86.011103](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.011103). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.011103>.
- [47] Nicholas Metropolis et al. “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”. Em: *The Journal of Chemical Physics* 21.6 (jun. de 1953), pp. 1087–1092. ISSN: 0021-9606. DOI: [10.1063/1.1699114](https://doi.org/10.1063/1.1699114). eprint: [https://pubs.aip.org/aip/jcp/article-pdf/21/6/1087/18802390/1087\1\\_online.pdf](https://pubs.aip.org/aip/jcp/article-pdf/21/6/1087/18802390/1087\1_online.pdf). URL: <https://doi.org/10.1063/1.1699114>.
- [48] K. Binder e D. W Heermann. *Monte carlo simulation in statistical physics An introduction*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer Verlag, 1992. ISBN: 3-540-55729-6. DOI: [10.1002/actp.1993.010440313](https://doi.org/10.1002/actp.1993.010440313).
- [49] Michael E. Fisher e Michael N. Barber. “Scaling Theory for Finite-Size Effects in the Critical Region”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 28 (23 jun. de 1972), pp. 1516–1519. DOI: [10.1103/PhysRevLett.28.1516](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.28.1516). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.28.1516>.
- [50] K. Binder. “Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions”. Em: *Current Physics—Sources and Comments* 2 (1988). Ed. por John L. CARDY, pp. 79–100. ISSN: 0922-503X. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-87109->

- 1.50012-1. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488530900732X>.
- [51] Murty S. S. Challa, D. P. Landau e K. Binder. “Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions”. Em: *Phys. Rev. B* 34 (3 ago. de 1986), pp. 1841–1852. DOI: [10.1103/PhysRevB.34.1841](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.1841). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.34.1841>.
- [52] Jooyoung Lee e J. M. Kosterlitz. “Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions”. Em: *Phys. Rev. B* 43 (4 fev. de 1991), pp. 3265–3277. DOI: [10.1103/PhysRevB.43.3265](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.3265). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.3265>.
- [53] M.E.J. Newman e G.T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press, 1999. ISBN: 9780198517962. URL: <https://books.google.com.br/books?id=KKL2nQEACAAJ>.
- [54] David P. Landau e Kurt Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. 2ª ed. Cambridge University Press, 2005.
- [55] Gary Willis, Gunnar Pruessner e Jonathan Keelan. “Minimalistic real-space renormalization of Ising and Potts Models in two dimensions”. Em: *Frontiers in Physics* 3 (jun. de 2015). DOI: [10.3389/fphy.2015.00046](https://doi.org/10.3389/fphy.2015.00046).
- [56] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. 2ª ed. Cambridge University Press, 2004.
- [57] Alejandra I. Guerrero, Daniel A. Stariolo e Noé G. Almarza. “Nematic phase in the  $J_1$ – $J_2$  square-lattice Ising model in an external field”. Em: *Phys. Rev. E* 91 (5 mai. de 2015), p. 052123. DOI: [10.1103/PhysRevE.91.052123](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.91.052123). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.052123>.
- [58] Andrea Pelissetto e Federico Ricci-Tersenghi. *Large Deviations in Monte Carlo Methods*. Ed. por Angelo Vulpiani et al. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014, pp. 161–191. ISBN: 978-3-642-54251-0. DOI: [10.1007/978-3-642-54251-0\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-642-54251-0_6). URL: [https://doi.org/10.1007/978-3-642-54251-0\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-642-54251-0_6).
- [59] Wen Zhang e Stephan Haas. “Adaptation and performance of the Cartesian coordinates fast multipole method for nanomagnetic simulations”. Em: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 321.22 (2009), pp. 3687–3692. ISSN: 0304-8853. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2009.07.016>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488530900732X>.
- [60] P.B. Visscher e D.M. Apalkov. “Simple recursive implementation of fast multipole method”. Em: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 322.2 (2010), pp. 275–281. ISSN: 0304-8853. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2009.09.033>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885309009287>.

- 
- [61] Fabio Müller et al. “Fast, Hierarchical, and Adaptive Algorithm for Metropolis Monte Carlo Simulations of Long-Range Interacting Systems”. Em: *Phys. Rev. X* 13 (3 jul. de 2023), p. 031006. DOI: [10.1103/PhysRevX.13.031006](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.13.031006). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.13.031006>.

Apêndices

Somas de Ewald e Convenção da Mínima Imagem

Informações técnicas

# APÊNDICE A – Somas de Ewald e Convenção da Mínima Imagem

Para incluir a interação dipolar no modelo, precisamos de um método eficiente para calcular a energia dipolar para uma dada configuração dos spins. O problema é complicado pela convergência lenta das somas dipolares. Essas somas podem ser tratadas usando uma das variantes do método de somas de Ewald [2].

A base do método de somas de Ewald consiste na separação da interação dipolar em uma parte de curto alcance e uma parte de longo alcance. Podemos tornar a convergência da parte de longo alcance mais rápida transformando a expressão para o espaço de momentos. A técnica restringe a soma sobre os estados apenas a estados que são periódicos.

No decorrer do trabalho, realizamos algumas das simulações utilizando o método de somas de Ewald, a fim de poder comparar o efeito dos diferentes modos de tratar as condições de contorno periódicas. A comparação do comportamento de algumas quantidades termodinâmicas de interesse calculadas utilizando o método de somas de Ewald ou a convenção da mínima imagem (MIC, do inglês *Minimum Image Convention*) podem ser vistas na figura A. Essas comparações foram feitas utilizando o método de Parallel Tempering com  $L = 48$ ,  $\delta = 2$  e  $M = 100$  temperaturas, determinadas pelo método iterativo de Hukushima e Nemoto [7], com  $0.6 \leq T \leq 1.6$ .

Pelo que podemos observar, a única transição que sofreu uma ligeira modificação com a variação dos métodos foi aquela associada à perda da ordem posicional, isto é, a transição faixas-nemática. O comportamento na transição nemática-líquido-tetragonal ficou praticamente inalterado.

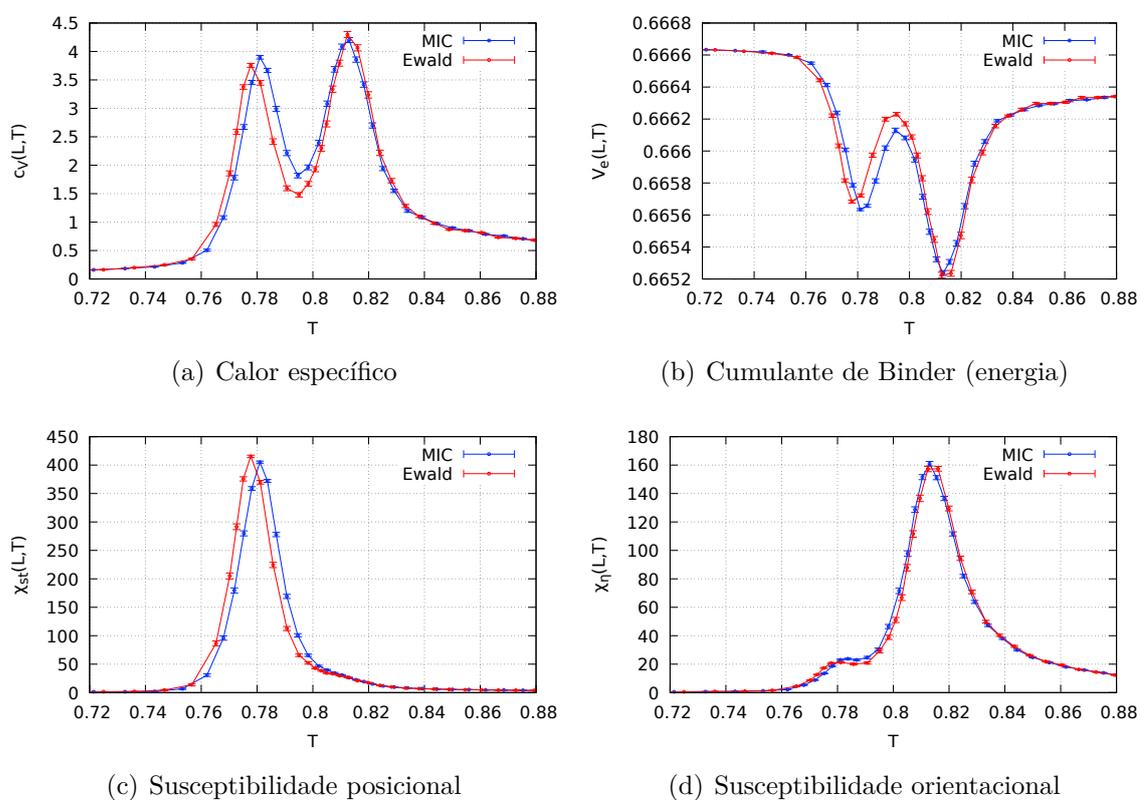


Figura 37 – Comparação do comportamento de quantidades termodinâmicas relevantes utilizando os métodos de Somas de Ewald e Convenção da Mínima Imagem (MIC) para  $L = 48$  e  $\delta = 2$ .

## APÊNDICE B – Informações técnicas

As simulações do modelo Ising dipolar com o algoritmo de Parallel Tempering foram realizadas nos *clusters* de computadores *fisica-01*, *Araponga* e *Jarvis* da Universidade Federal de Santa Catarina, bem como no computador pessoal do autor dessa dissertação. Estes constituem os principais recursos utilizados para a obtenção dos resultados do presente trabalho. A tabela 4 mostra os tempos de simulação de  $M = 100$  sistemas com o algoritmo de Parallel Tempering para os diferentes tamanhos de sistema.

Tabela 4 – Tempo aproximado das simulações do modelo Ising dipolar com o algoritmo de Parallel Tempering, para  $\delta = 2$ ,  $t_{max} = 10^4$  MCS,  $N_{swaps} = 10^4$  MCS e  $M = 100$  temperaturas (sistemas).

L	Tempo aproximado de simulação (dias)
32	4
36	6
40	10
48	18
56	33
64	56

No desenvolvimento do presente trabalho, também realizamos simulações do modelo Ising dipolar apenas com o algoritmo de Metropolis, utilizando de protocolos de aquecimento e resfriamento. Complicações relacionadas à frustração, metaestabilidade e ao caráter de longo alcance da interação dipolar fazem com que seja necessário descartar longos regimes transientes para a equilíbrio em cada uma das temperaturas, e períodos tão ou mais longos para obtenção dos dados de interesse. As simulações dos maiores sistemas ( $L = 64$ ) apenas com o algoritmo de Metropolis foram tão longas quanto as de *Parallel Tempering* para o mesmo tamanho - correndo o risco de apresentar de loops de histerese e outros efeitos associados à metaestabilidade.

As simulações de Monte Carlo do modelo Ising dipolar com o algoritmo de Metropolis presentes na literatura costumam ser realizadas com longos períodos de equilíbrio (da ordem de  $10^7$  a  $10^8$  MCS) e longos períodos de medição, também da ordem de  $10^7$  a  $10^8$  MCS, podendo variar dependendo do tamanho do sistema simulado. Nossos resultados sugerem que o método de *Parallel tempering* nos permite obter uma estatística tão boa quanto as simulações tradicionais de Monte Carlo com o algoritmo de Metropolis ou banho térmico, mas com tempos de simulação menores. Ao invés de realizarmos uma simulação longa em uma única temperatura, realizamos várias simulações curtas, cada uma em sua devida temperatura, e o processo de trocas de temperaturas ajuda o sistema a equilibrar adequadamente - não sendo necessário descartar longos períodos transientes, como nas

simulações tradicionais do modelo.

O método de *Parallel Tempering* se mostrou bastante eficiente na equilíbrio/termalização dos sistemas de baixas temperaturas. Quando simulamos apenas uma temperatura por vez, o sistema corre o risco de ficar preso em estados metaestáveis por longos períodos de tempo, incapaz de superar as barreiras de energia e equilibrar adequadamente, pois as flutuações térmicas não permitem que o sistema explore o espaço de configurações de maneira eficiente. Quando simulamos vários sistemas de maneira independente e simultânea, eventualmente propondo trocas de temperatura entre os sistemas, as trocas de temperaturas permitem que os sistemas de baixas temperaturas, presos em mínimos locais, visitem configurações de temperaturas mais altas e consigam superar as barreiras de energia, equilibrando adequadamente.

A moral da história é: não existe almoço grátis. As simulações tradicionais de Monte Carlo com algoritmos locais de atualização são menos custosas - no sentido de que estamos simulando apenas um sistema por vez - mas requerem longos tempos de equilíbrio e medição. As simulações de *Parallel Tempering* são mais custosas, pois necessitam a simulação de vários sistemas, mas o processo de trocas de temperatura ajuda na equilíbrio de cada sistema, não sendo necessário descartar longos períodos de equilíbrio.